

JAMILLE KESSIA ARAUJO MARTINS

**MODELAGEM EULER-LAGRANGE DA EVAPORAÇÃO DE
UM SPRAY MULTICOMPONENTE EM MEIO
HETEROGÊNEO**



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA**

2023

JAMILLE KESSIA ARAUJO MARTINS

**MODELAGEM EULER-LAGRANGE DA EVAPORAÇÃO DE UM SPRAY
MULTICOMPONENTE EM MEIO HETEROGÊNEO**

Dissertação apresentada ao Programa de 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 dos Fluidos.

Orientador: Prof. Dr. João Marcelo Vedovotto

UBERLÂNDIA - MG
2023

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

M386 Martins, Jamille Késsia Araújo, 1997-
2023 Modelagem euler-lagrange da evaporação de um spray
multicomponente em meio heterogêneo [recurso eletrônico]
/ Jamille Késsia Araújo Martins. - 2023.

Orientador: João Marcelo Vedovotto.
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de
Uberlândia, Pós-graduação em Engenharia Mecânica.
Modo de acesso: Internet.
Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.di.2023.407>
Inclui bibliografia.

1. Engenharia mecânica. I. Vedovotto, João Marcelo,
1981-, (Orient.). II. Universidade Federal de
Uberlândia. Pós-graduação em Engenharia Mecânica. III.
Título.

CDU: 621



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.posmecanicaufu.com.br - secposmec@mecanica.ufu.br



ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-Graduação em:	Engenharia Mecânica				
Defesa de:	Dissertação de Mestrado Acadêmico, nº 640, PPGEM				
Data:	21/07/2023	Hora de início:	09:00	Hora de encerramento:	10 : 50
Matrícula do Discente:	12212EMC006				
Nome do Discente:	Jamille Kessia Araújo Martins				
Título do Trabalho:	MODELAGEM EULER-LAGRANGE DA EVAPORAÇÃO DE UM SPRAY MULTICOMPONENTE EM MEIO HETEROGÊNEO				
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:	"Modelagem matemática e computacional de processos de corrosão e erosão em superfícies metálicas em tubulações das Unidades de Refino"				

Reuniu-se por meio de videoconferência a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, assim composta: Professores Doutores: Aristeu da Silveira Neto - FEMEC/UFU; Ricardo Serfaty - PETROBRAS; e João Marcelo Vedovotto - FEMEC/UFU, orientador da candidata.

Iniciando os trabalhos o presidente da mesa, Dr. João Marcelo Vedovotto, apresentou a Comissão Examinadora e a candidata, agradeceu a presença do público, e concedeu à Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação da 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). Ultimeada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando o(a) candidato(a):

Aprovada.

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 21/07/2023, às 10:48, 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 **Aristeu da Silveira Neto, Professor(a) do Magistério Superior**, em 21/07/2023, às 10:49, 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 **ricardo serfaty, Usuário Externo**, em 21/07/2023, às 10:49, 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 **4602596** e o código CRC **7564BCCF**.

*"Uma mente que se abre a uma nova ideia
jamais voltará ao seu tamanho original."*

(Albert Einstein)

AGRADECIMENTOS

Durante este tempo de mestrado gostaria de deixar meu agradecimento a algumas pessoas que me acompanharam e foram fundamentais para a realização de mais este sonho.

Em primeiro lugar gostaria de agradecer a Deus por tudo que ele tem feito na minha vida até hoje, em priori, com relação as pessoas maravilhosas que venho conhecendo no decorrer da minha trajetória. Gostaria de agradecer especialmente meu orientador Prof. Dr. João Marcelo Vedovotto, por toda a paciência, suporte e amizade com que sempre me orientou. Obrigado por sua dedicação e por sempre ter acreditado em mim desde a época da graduação, sem seu apoio nada disso seria possível.

Gostaria de agradecer também a minha mãe Elvira e a minha irmã Mirian por estarem sempre do meu lado, me dando suporte e carinho nos momentos difíceis.

Agradeço também a minha tia Paula e ao meu tio Magalhães por todo apoio que me foi dado até aqui, sou muito grata de coração por todo suporte e principalmente por terem sempre acreditado em mim.

Agradecer também a todos os meus colegas, professores e funcionários envolvidos do MFLab e dos projetos associados. Obrigado pelo acolhimento, orientação e por todo carinho recebido.

Quero também agradecer aos membros que se disponibilizaram a fazer parte da minha banca Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto e Dr. Ricardo Serfaty.

Minha gratidão também a todos os meus amigos do MFLab em especial meus colegas Ricardo, Luís, Pedro, Alex, João, Jonatas, Ophir, Alejandro, Vini, Christopher e Lucas. Obrigado por todo suporte e parceria que sempre recebi de vocês.

Por fim gostaria de agradecer também ao suporte financeiro e técnico recebido da Petróleo Brasileiro S.A. (Petrobras) como também do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq). A todos minha imensa gratidão.

MARTINS, J.K.A, **Modelagem euler-lagrange da evaporação de um spray multicomponente em meio heterogêneo**. 2023. 96 f. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

RESUMO

No presente trabalho, um modelo de componentes discretos (DCM), baseado nas soluções analíticas das equações de balanço de energia e de espécies químicas, juntamente com o modelo do Abramzon-Sirignano, é aplicado para analisar o aquecimento e a evaporação de gotículas envolvendo um caso de injeção de spray de querosene (Jet A) em um ambiente inerte e heterogêneo altamente aquecido. Avaliar e compreender a influência dada por um escoamento inerte do tipo heterogêneo em um caso de injeção de spray envolvendo o processo de evaporação multicomponente é o escopo deste trabalho, no qual apresentou como um dos objetivos básicos a formação e o entendimento do código MFSim, desenvolvido no MFLab, com relação a evaporação multicomponente que está presente nas rotinas de modelagem lagrangiana da plataforma. O trabalho se baseia de maneira priori na revisão e análise deste processo com relação a um ambiente heterogêneo, no qual se teve como desfecho a implementação e inserção de novas rotinas tanto para a computação do coeficiente de difusividade da mistura como para a determinação de parâmetros termodinâmicos necessários tais como densidade, viscosidade dinâmica, condutividade térmica e calor específico. Neste sentido para estabelecer uma avaliação deste processo em um ambiente gasoso inerte de múltiplas espécies foi examinada a evaporação de uma única gota em uma solução gasosa do tipo ar atmosférico, em que para tal análise a verificação do comportamento evaporativo associado em um ambiente dado por uma única espécie com relação a um ambiente contendo mais de uma foi investigado, no qual por fim contou com a avaliação de um caso complexo de injeção envolvendo gotas de querosene (jet A) inseridas em um ambiente gasoso inerte de várias espécies. A análise de tal caso se baseou na avaliação da frações mássicas médias obtidas ao longo de linhas do domínio, como também no comportamento de parâmetros atrelados como temperatura do gás e termos fontes de massa e energia. Para todos os casos avaliados e comparados os resultados obtidos se demonstraram apresentar um comportamento físico esperado.

Palavras-chave: evaporação de gotículas, combustível multicomponente, coeficiente de difusão.

ABSTRACT

In the present work, a Discrete Component Model (DCM) based on the analytical solutions of heat transfer and species diffusion equations, together with the Abramzon-Sirignano model, is applied to analyze the heating and evaporation of droplets involving a case of Jet A kerosene spray injection in a highly heated, inert, and heterogeneous environment. The scope of this work is to assess and understand the influence of a heterogeneous inert flow in a spray injection case involving multicomponent evaporation process. One of the main objectives of this work is to develop and comprehend the MFSim code implemented in MFLab, specifically in relation to the multicomponent evaporation routines within the Lagrangian modeling platform. The work is primarily based on the review and analysis of this process in a heterogeneous environment, which resulted in the implementation and incorporation of new routines for computing the mixture diffusivity coefficient and determining the necessary thermodynamic parameters such as density, dynamic viscosity, thermal conductivity, and specific heat. To evaluate this process in an inert gas environment with multiple species, the evaporation of a single droplet in an atmospheric air gas solution was examined. This analysis focused on comparing the evaporative behavior associated with a single-species environment to that of an environment containing multiple species. Finally, a complex injection case involving Jet A kerosene droplets injected into an inert gas environment with multiple species was evaluated. The analysis of this case involved assessing the average mass fractions obtained along domain lines, as well as studying the behavior of associated parameters such as gas temperature and mass and energy source terms. For all evaluated and compared cases, the obtained results demonstrated the expected physical behavior.

Keywords: droplet evaporation, multicomponent fuel, diffusion coefficient.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
1.1	Problema	10
1.2	Motivação	12
1.3	Objetivo	17
2	MODELAGEM EULER-LAGRANGE	19
2.1	Modelagem matemática	20
2.1.1	Fase contínua	20
2.1.2	Fase discreta	24
2.1.3	Acoplamento entre fases	28
2.2	Metodologia numérica	28
3	MODELAGEM DE AQUECIMENTO E DE EVAPORAÇÃO DE GOTA	30
3.1	Modelagem matemática	31
3.1.1	Taxa de evaporação	31
3.1.2	Aquecimento convectivo	36
3.1.3	Difusão de espécies	41
3.2	Detalhamento numérico e computacional	44
3.3	Composição do combustível Jet A reduzido	46
3.4	Propriedades termodinâmicas e de transporte dos componentes	47
4	RESULTADOS	51
4.1	Análise do aquecimento e da evaporação de uma única gota multicomponente em um ambiente inerte (ar)	51
4.2	Injeção spray em um ambiente gasoso aquecido	54
5	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	85
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	88

INTRODUÇÃO

A pulverização de gotas em um ambiente gasoso tem se demonstrado um processo de significativo estudo por parte de diversos pesquisadores desde o começo do século passado (SAZHIN, S. S., 2018). Tal interesse é justificado pela presença desse fenômeno em uma vasta gama de aplicações, desde sistemas de injeção direta utilizados em motores de aviões e automóveis até em dispositivos de supressão de incêndio, pintura e aerossóis médicos (CHOUDHURY, 2019). Sprays líquidos são conhecidos por apresentarem escoamento do tipo bifásico de significativa complexidade no qual diversos processos físicos tais como atomização, dispersão, aquecimento entre fases, transferência de massa, quantidade de movimento e mistura turbulenta de espécies químicas ocorrem todos simultaneamente, interligados de uma maneira complexa e em múltiplos tempos e comprimentos característicos. (JENNY; RO-EKAERTS; BEISHUIZEN, 2012a).

Tendo como análise os sistemas de injeção direta, basicamente o combustível entra na câmara de combustão no estado líquido e durante a injeção se desintegra em gotículas por atomização, que evaporam antes ou de maneira concomitante com a combustão. Este entendimento convencional da formação de um spray quando o combustível líquido é injetado em um ambiente gasoso aquecido é baseado no acontecimento das seguintes etapas: de quebra primária que é atrelada ao desenvolvimento de um jato pulverizado, seguido pela sua conversão em lâminas e ligamentos líquidos, que são decompostos em gotas relativamente grandes, e a de quebra secundária que se define como a desintegração destas partículas em gotas menores. Como consequência, torna-se interessante salientar que usualmente os processos de atomização de combustíveis líquidos são modelados com base em uma análise distinta entre os fenômenos de quebra primária e secundária.

Os combustíveis líquidos com atuação significativa na maioria das aplicações envolvendo pulverização de gotículas, tais como gasolina, querosene e petróleo, possuem em sua composição uma quantidade extensa de hidrocarbonetos, que quando contabilizados em processos envolvendo o aquecimento e evaporação de gotas, são responsáveis por elevar o nível de complexidade do problema modelo em questão. Isso ocorre uma vez que diferentes componentes evaporam em taxas distintas criando dessa forma na fase líquida um gradiente de concentração responsável por promover a difusão das espécies no interior das gotículas (SAZHIN, S. S., 2017).

Durante a difusão mássica destas espécies, os componentes mais voláteis presentes na superfície da gota evaporam mais rápido, enquanto que os menos voláteis levam mais tempo para realizar a mudança de fase. Logo, a tendência é que as espécies mais voláteis do interior sejam propensas a migrarem para a superfície da gota, tornando, portanto, a composição e a distribuição destas espécies presentes suscetíveis a variações significativas durante todo o tempo de vida da gota (PINHEIRO et al., 2022). Por este motivo considerar o processo de difusão mássica das espécies na modelagem do aquecimento e evaporação de gotículas multicomponentes torna-se necessário (SIRIGNANO, W. A., 2000).

1.1 Problema

Diversas modelagens propostas envolvendo o aquecimento e a evaporação de gotículas multicomponentes a priori combustíveis, podem e vêm sendo encontradas na literatura de maneira considerável (COONEY; SINGER, 2019; WANG, P. et al., 2019; POULTON et al., 2020; SINGER; HAYES; COONEY, 2021; KABIL et al., 2021; HAYES, 2021; PINHEIRO; RYBDYLOVA et al., 2021; MURAMATSU et al., 2022). A simplificação com relação a composição da fase gás carreadora ao redor das gotas é aplicada em grande parte destes modelos, assumindo possuírem como composição a presença de uma única espécie constituinte, responsável por representar toda a solução gasosa em questão.

Tal simplificação trata basicamente de uma abordagem comum em modelos de evaporação de gotículas, no qual se é adotada para reduzir a complexidade do sistema e facilitar o cálculo do processo de evaporação envolvido. No entanto embora tal consideração possa simplificar os cálculos, torna-se importante reconhecer as suas limitações, a priori, para casos em que a composição real do ambiente seja bastante complexa.

As interações destas múltiplas espécies de gás com as gotículas presentes podem afetar em um dado processo a taxa de evaporação, as reações químicas formadas e as propriedades do sistema como um todo.

Portanto, ao simplificar a fase gasosa por uma única espécie carreadora, é importante estar ciente de que isso pode introduzir certas limitações e uma perda de precisão em relação ao cenário real. É necessário avaliar cuidadosamente o contexto e os objetivos da simulação para determinar se essa simplificação é apropriada ou se uma abordagem mais detalhada, considerando múltiplas espécies, é necessária.

As vantagens de contabilização de todas as espécies se resumem nesse sentido da seguinte maneira:

- **Composição do ambiente:** O ambiente considerado pode conter uma variedade de gases, no qual tais espécies gasosas podem interagir com a gota de diferentes maneiras durante o processo de evaporação.
- **Interações químicas:** A evaporação de uma gota pode envolver reações químicas entre os componentes do combustível e as espécies gasosas presentes no ambiente. Por exemplo, reações de combustão ou oxidação podem ocorrer durante a evaporação, resultando em produtos diferentes. Ignorar as outras espécies gasosas pode levar a uma representação incompleta do processo de evaporação e das reações químicas associadas.
- **Influência na taxa de evaporação:** A presença de diferentes espécies gasosas no ambiente pode afetar a taxa de evaporação da gota. Por exemplo, a difusão dos componentes do combustível para o ambiente e a difusão dos gases do ambiente para a superfície da gota podem ser influenciadas por diferentes fatores, como tamanho molecular, pressão parcial e coeficiente de difusão. Portanto, considerar todas as espécies gasosas presentes permite uma representação mais precisa da taxa de evaporação.

Portanto, ao simular a evaporação de uma gota, é recomendável considerar todas as espécies gasosas do ambiente, levando em conta suas propriedades químicas e físicas. Isso permite uma análise mais completa e precisa do processo de evaporação e suas interações com o ambiente circundante.

1.2 Motivação

As modificações propostas no presente trabalho são motivadas por um problema complexo de projeto presente nas indústrias petrolíferas, mais especificamente em sistemas de topo de colunas de destilação atmosférica, no qual enfrentam como inconveniente o insistente controle da corrosão.

O controle de tal processo em sistemas de topo de unidades de processamento de óleo cru tem sido um desafio desde os primórdios da indústria do petróleo, que com o passar dos anos, vem se tornando cada vez mais desafiante devido ao processamento de petróleos cada vez mais pesados e que contém um maior teor de contaminantes, levando consequentemente a um ambiente ainda mais corrosivo. A destilação do petróleo cru em uma torre de destilação atmosférica é o primeiro passo no processo de refino do petróleo e, consequentemente, estas unidades são mais afetadas por problemas de corrosão. Essa etapa é chamada de destilação atmosférica porque ocorre em condições de pressão atmosférica normal (GONÇALVES, 2007).

A torre de destilação atmosférica é uma estrutura alta, vertical e cilíndrica, geralmente feita de aço, na qual o petróleo cru é aquecido Fig.1.1. O objetivo de tal arranjo serve basicamente para separar os diferentes componentes do petróleo bruto com base em suas temperaturas de ebulição, ou seja, para a fragmentação e separação do óleo cru em determinados produtos de acordo com a pressão de vapor e o ponto de ebulição de cada produto.



Figura 1.1: Torre de destilação atmosférica. Fonte:(SI, 2023)

Em uma torre de destilação, o petróleo bruto antes de entrar na coluna, primeiramente passa por um processo de "dessalgação" que se refere basicamente com a retirada de água e de sais minerais, sendo posteriormente enviado a um forno de aquecimento. Após o aquecimento, o óleo é injetado na base da torre no qual de acordo com a pressão de vapor dos hidrocarbonetos presentes, os produtos mais leves vão para o topo da torre, conforme demonstrado em Fig. 1.2

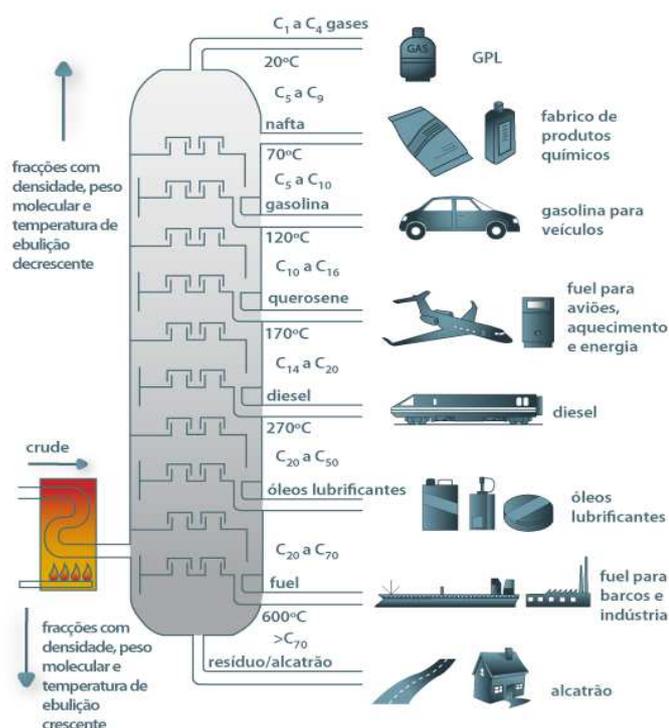


Figura 1.2: Por dentro de uma Coluna de Destilação Fracionada. Fonte:(CBIE,2023)

A possibilidade de corrosão da estrutura acontece quando durante processo de destilação na produção de derivados do petróleo, é possível que contaminantes presentes no óleo ou gerados durante o aquecimento se acumulem na linha de topo. Em função disso, em um processo de produção de derivados do petróleo é comum a prática de algumas medidas para evitar e combater possíveis problemas de corrosão.

Dentre alguns agentes causadores de tal processo em sistemas de topo se destaca a corrosão por ácido clorídrico no qual se define como um problema comum enfrentado na indústria de processamento de petróleo. O ácido clorídrico pode ser formado durante a destilação, principalmente a partir da decomposição de compostos orgânicos clorados presentes na alimentação da coluna. A presença de tal componente em concentrações elevadas pode causar corrosão nas linhas de topo, o que pode levar a vazamentos, falhas estruturais e redução

da vida útil dos equipamentos. A corrosão por ácido clorídrico é especialmente problemática em áreas onde há condensação de água ácida, pois isso pode acelerar o processo corrosivo (SILVA, G. P. D. M. da, 2017).

Outros agentes que também contribuem para o processo de corrosão nas linhas de topo são os sais de amônia e sulfetos presentes nos topo das colunas de destilação atmosférica. Tal tipo está associado à presença de compostos de enxofre, como o sulfeto de hidrogênio (H₂S), na alimentação da coluna. Quando a alimentação contém concentrações significativas de sais de amônio, como cloreto de amônio (NH₄Cl), e sulfetos, como sulfeto de hidrogênio, esses compostos podem se acumular nas linhas de topo e causar corrosão. A corrosão ocorre devido à reação química entre os sais e os sulfetos presentes com o metal das linhas de topo, resultando em danos e enfraquecimento das estruturas (FROEHLICH, 2017).

A erosão em sistemas de topo também se caracteriza como um agente causador comum do processo de corrosão. A erosão ocorre quando partículas sólidas, como areia, partículas de catalisador ou impurezas presentes na alimentação da coluna, entram em contato com as linhas e causam danos mecânicos e corrosão acelerada. A erosão pode causar desgaste progressivo das linhas de topo, levando à redução da espessura do metal, formação de furos e falhas estruturais. A corrosão associada à erosão é especialmente problemática em áreas onde ocorre o impacto em alta velocidade das partículas sólidas, resultando em desgaste acelerado e danos localizados (SILVA, P. A. L., 2023).

Diante de tudo isso torna-se portanto necessária a introdução de técnicas ou práticas que possam provocar a redução do processo de corrosão em sistemas de topo, sendo a manutenção de máxima eficiência de dessalgação uma delas. A presença de sal no petróleo pode levar à corrosão de metais, como aço e ferro, que são comumente usados na construção de tubulações, trocadores térmicos e outros equipamentos da refinaria. A corrosão ocorre quando o sal entra em contato com a superfície metálica, formando produtos corrosivos que danificam o material ao longo do tempo. Isso pode levar a vazamentos, falhas estruturais e interrupções na produção. Nesse sentido manter a eficiência da dessalgação é essencial para remover a maior parte do sal presente no petróleo. Ao lavar o petróleo com água doce, a maior parte do sal é removida, reduzindo desta maneira a concentração de substâncias corrosivas. Isso ajuda a proteger os equipamentos e tubulações da corrosão, prolongando sua vida útil e evitando custos elevados de reparo e substituição.

A técnica de injeção de um agente neutralizante à base de amina também é bastante utilizada nas linhas de topo. Tal prática é particularmente importante em refinarias devido à presença de produtos químicos corrosivos e ácidos no processo de refino do petróleo. Isso porque durante as diferentes etapas do refino, podem ser gerados subprodutos ácidos, como ácido sulfúrico e ácido clorídrico, que podem causar corrosão nas tubulações, equipamentos e estruturas metálicas da refinaria. A injeção de um agente neutralizante à base de amina tem a função de neutralizar esses ácidos presentes nos fluidos corrosivos. As aminas têm a capacidade de reagir com os ácidos, formando sais de aminas não corrosivos. Esses sais de aminas formam uma camada protetora nas superfícies metálicas, evitando que os ácidos entrem em contato direto com o metal. Ao manter a injeção contínua desse agente neutralizante à base de amina, é possível prevenir a corrosão e proteger os equipamentos e tubulações da refinaria. Isso prolonga a vida útil dos ativos, evita falhas estruturais e minimiza os riscos de vazamentos, que poderiam resultar em danos ambientais, interrupções na produção e riscos para a segurança dos trabalhadores (KLAUCK, 2015).

Outro artifício bastante utilizado se refere ao uso de inibidores de corrosão, tais são projetados para proteger os equipamentos, tubulações e estruturas metálicas contra os efeitos prejudiciais dos ambientes corrosivos presentes nas operações de refino. Como já dito, existem vários fatores que podem levar à corrosão em refinarias, como a presença de produtos químicos corrosivos, altas temperaturas, umidade e condições ambientais agressivas. Nesse sentido os inibidores de corrosão são substâncias químicas que, quando adicionadas a um sistema, formam uma camada protetora na superfície metálica, impedindo que o meio corrosivo entre em contato direto com o metal. Essa camada atua como uma barreira física ou química, reduzindo a taxa de corrosão e protegendo o metal contra danos. Os inibidores podem ser aplicados de diferentes maneiras, como por injeção direta nos sistemas, misturados com o fluido corrosivo ou aplicados como revestimentos protetores. Eles podem atuar de várias maneiras, como formando uma película passivadora na superfície metálica, absorvendo reagentes corrosivos ou atuando como bloqueadores de reações químicas que levam à corrosão. Ao utilizar inibidores de corrosão adequadamente, é possível reduzir significativamente a taxa de corrosão e os danos causados aos equipamentos e estruturas nas refinarias (MARQUES et al., 2022).

A prática de injeção contínua ou intermitente de água amoniacal também se define como uma prática bastante comum e importante para evitar a corrosão em refinarias devido

às suas propriedades inibidoras de corrosão. A água amoniacal é uma solução composta por água e amônia, e sua aplicação nos sistemas e equipamentos das refinarias oferece benefícios significativos na prevenção da corrosão. Primeiramente a água amoniacal, quando injetada nos sistemas, forma uma película protetora na superfície metálica. Essa película age como uma barreira física, impedindo que o meio corrosivo entre em contato direto com o metal, reduzindo assim a taxa de corrosão. Além disso, a amônia presente na água amoniacal tem propriedades alcalinas e é capaz de neutralizar ácidos que podem estar presentes no sistema. Ao neutralizar os ácidos, a água amoniacal ajuda a prevenir reações corrosivas entre os ácidos e o metal, reduzindo a corrosão. Além de formar uma camada protetora e neutralizar ácidos, a água amoniacal também pode agir como um inibidor de corrosão químico. Ela pode reagir com a superfície metálica, formando uma camada passivadora que diminui a taxa de corrosão e protege o metal contra danos. A injeção contínua ou intermitente de água amoniacal permite manter a proteção contra a corrosão de forma contínua ao longo do tempo. A aplicação regular desse agente inibidor ajuda a manter a integridade dos equipamentos e tubulações, prolongando sua vida útil e reduzindo a ocorrência de falhas causadas pela corrosão (GONÇALVES, 2007).

Como se pode verificar o uso de atomizadores se demonstra presente em quase todas as técnicas citadas que corroboram para a redução do processo de corrosão em linhas de topo. De fato, o uso de bicos injetores nas unidades de refinaria acontece de maneira significativa em diversas etapas do sistema como um todo.

O resfriamento é uma das principais funções dos sprays no sistema de topo. Durante o processo de destilação, os vapores quentes sobem pela coluna de destilação e precisam ser resfriados para que possam condensar e serem coletados como produtos líquidos separados. Os sprays são usados nesse sentido para pulverizar líquidos de resfriamento, como água, na parte superior da coluna, permitindo que os vapores sejam resfriados e condensados. Adicionalmente, os vapores que sobem na coluna de destilação podem conter impurezas, como compostos indesejados ou contaminantes. Os sprays são também usados para pulverizar líquidos de lavagem, como solventes ou produtos químicos específicos, que podem reagir com essas impurezas e ajudar a removê-las dos vapores.

Além disso, durante a destilação, é importante evitar o arrasto de líquido para as seções superiores da coluna de destilação, pois isso pode afetar negativamente a eficiência do processo. Os sprays são usados para criar uma camada líquida nas partes superiores da

coluna, agindo como uma barreira para evitar o arraste de líquido indesejado para as seções superiores. Os sprays são também usados para distribuir líquidos uniformemente nas partes superiores da coluna de destilação. Isso é crucial para garantir uma destilação eficiente e uma separação adequada dos componentes desejados.

Em co-relação com os sistemas de injeção, o processo de evaporação multicomponente nas refinarias se demonstra de maneira significativa, podendo ocorrer em várias etapas, como na destilação, na recuperação de solventes ou na remoção de componentes voláteis. Em uma torre de destilação, por exemplo, a evaporação multicomponente é fundamental para separar os diferentes componentes presentes no petróleo bruto, pois cada componente tem um ponto de ebulição específico. A torre de destilação é projetada de forma a permitir que os componentes mais voláteis evaporem e sejam coletados como vapores na parte superior da coluna, enquanto os componentes menos voláteis permanecem como líquidos na parte inferior.

A evaporação multicomponente em ambientes de alta pressão e temperatura requer um controle cuidadoso das condições operacionais para garantir uma separação eficiente e precisa dos componentes desejados. O uso de sprays é comum nesse contexto, pois eles podem ajudar a facilitar o processo de evaporação, fornecendo uma superfície de contato líquido-gás maior e permitindo a transferência de massa entre as fases líquida e gasosa. Além disso, os sprays podem ser usados para introduzir líquidos voláteis na corrente de gás, promovendo a vaporização rápida e eficiente dos componentes desejados. Isso é especialmente relevante em processos como a recuperação de solventes, onde a vaporização dos solventes é essencial para a sua posterior recuperação e reutilização.

Em resumo, a evaporação multicomponente é uma função importante em refinarias e ocorre em ambientes de alta pressão e temperatura no qual uma solução complexa de gases está presente. O uso de sprays pode facilitar esse processo, proporcionando uma maior área de superfície líquido-gás e promovendo portanto a vaporização dos componentes desejados.

1.3 Objetivo

O objetivo principal do presente trabalho se baseia na contabilização destas espécies de gás constituintes em um modelo de aquecimento e evaporação de gotas de combustível, mais especificamente o jet A. O modelo em questão foi parcialmente implementado em (PI-

[NHEIRO et al., 2022](#)) e se trata do modelo de componentes discretos (DCM) que é baseado na solução analítica das equações de transferência de energia térmica e de difusão de espécies, em conjunto com o modelo do Abramzom-Sirignano, no qual são empregados para a análise do aquecimento e evaporação de gotas multicomponentes.

MODELAGEM EULER-LAGRANGE

Na maioria das aplicações que envolve a combustão de sprays líquidos, as gotículas presentes no sistema são menores do que o menor comprimento da malha computacional associada, o que torna favorável neste caso a utilização de uma estrutura euleriana para a fase carreadora do gás em conjunto com uma abordagem lagrangiana sobre as gotículas líquidas de combustível (FAETH, 1983; JENNY; ROEKAERTS; BEISHUIZEN, 2012b). Sob o ponto de vista euleriano a fase contínua respectiva do sistema é modelada com base na resolução das equações de balanço de massa, quantidade de movimento linear, energia e de espécies envolvidas, enquanto que sobre o referencial lagrangiano as gotas se assumem como partículas pontuais inerciais que se deslocam em conjunto com o campo de escoamento e que através de equações diferenciais ordinárias computam a evolução temporal de cada partícula com relação à posição, velocidade, diâmetro e temperatura (PINHEIRO et al., 2022; SONTHEIMER; KRONENBURG; STEIN, 2021).

As distribuições espaciais e temporais das variáveis eulerianas envolvidas em todo domínio físico são profundamente impactadas pelo aquecimento e evaporação das gotículas lagrangianas, a priori nas regiões nas quais são encontradas as gotas. São tratadas aqui a mistura resultante do vapor de combustível evaporado em conjunto com a fase gás circundante, bem como a transferência de massa e energia entre a fase gasosa e líquida. Além disso, os gradientes escalares de temperatura e de frações mássicas das espécies envolvidas são as principais variáveis afetadas, no qual também impactam a avaliação das propriedades físicas, como a viscosidade e a densidade (PINHEIRO et al., 2022).

2.1 Modelagem matemática

O enfoque deste capítulo é abordar os modelos matemáticos que estão associados a abordagem Euler-lagrange utilizada neste trabalho, no qual a fase contínua do gás é modelada com base na resolução das equações de balanço, a fase dispersa líquida segundo as equações de trajetória, transferência de massa e de energia térmica e a de acoplamento entre estas duas fases que é feita através da inserção de uma série de termos fontes nas equações de tratamento do meio contínuo.

2.1.1 Fase contínua

As equações de balanço de massa, quantidade de movimento linear, energia e de massa para as espécies químicas envolvidas são dadas respectivamente pelas equações diferenciais parciais seguintes, as quais possuem como função a modelagem do escoamento referente a fase contínua.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = S_m^L, \quad (2.1.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + S_{u,i}^L, \quad (2.1.2)$$

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i c_p T}{\partial x_i} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + S_{c_p T}^L, \quad (2.1.3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = -\frac{\partial J_{k,i}}{\partial x_i} + S_k^L \quad (2.1.4)$$

onde ρ e a densidade, u_i a velocidade na direção i , p a pressão, τ_{ij} o tensor tensão viscosa, T a temperatura do gás, c_p o calor específico a pressão constante, k a condutividade térmica, e Y_k a fração mássica da k -ésima espécie. Os termos q_i e $J_{k,i}$ se referem respectivamente ao fluxo

de energia térmica e ao fluxo molecular de difusão das espécies, no qual são avaliados nesta ordem segundo as leis de Fourier e Fick (BIRD, 2002). S_m^L , $S_{u,i}^L$, $S_{c_p T}^L$, S_k^L são os termos fontes de massa, quantidade de movimento linear, energia e de espécies químicas envolvidas, no qual são responsáveis por levar em conta a existência da fase lagrangiana, t representa o tempo e ($i=1,2,3$) as três direções no espaço. É interessante salientar que os efeitos de Soret e Dufour foram ambos aqui negligenciados. A negligência de tais efeitos é justificada neste trabalho pelo fato do caso de injeção em estudo incluir uma variação de temperatura pequena ou negligenciável em relação ao efeito de mistura causado pelo próprio spray. Considerando um fluido newtoniano, o tensor tensão viscosa é dado por:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (2.1.5)$$

onde μ é a viscosidade do fluido e δ_{ij} o tensor delta de Kronecker.

A extrema complexidade da física envolvendo sprays líquidos de alta velocidade injetados em condições de temperatura e pressão elevadas se justifica pelas características de escoamento multi-níveis e multi-estágio envolvidas em sistemas do tipo. Logo para a modelagem da turbulência de tais casos, a metodologia LES (Large Eddy Simulation) é empregada no presente trabalho, no qual tal tratamento se destaca por garantir uma melhor captura do fenômeno de mistura em grande infinidade presente entre as fases gás ambiente e de vapor líquido gerado (LI, C.; CRUA; VOGIATZAKI, 2019).

Quando comparada com outras metodologias de simulação, a metodologia LES é capaz de garantir uma qualidade de precisão satisfatória com um custo computacional menos exigente que o DNS (Direct Numerical Simulation), além disso, também detecta com eficiência as instabilidades locais envolvidas, quando relacionado com o RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes). Nesse contexto, para sistemas envolvendo tais tipos de pulverização de alta velocidade a modelagem do tipo Euler-Lagrange é geralmente empregada, sendo, portanto, tal abordagem utilizada no presente trabalho.

2.1.1.1 Equações filtradas

Com um custo computacional menos exigente, para a solução adequada de escoamentos envolvendo fluidos newtonianos com alto número de Reynolds, se faz necessária a decomposição do espectro de estruturas turbilhonares em duas bandas utilizando-se o conceito de filtragem, no qual é feita a dedução das equações filtradas, com um custo adicional

associado que é conhecido de maneira famosa como problema de fechamento da turbulência (NETO, 2020).

Na metodologia LES o escoamento turbulento característico é decomposto por meio do processo de filtragem de informações, que implica na decomposição do espectro de energia pertencente em duas bandas: a primeira localizada antes da frequência de corte do filtro, que será calculado e que representa as grandes estruturas, e o segundo, posicionado após esta frequência que são as de pequenas estruturas e que necessita de modelagem. No presente trabalho para o espaço físico envolvido é adotada uma função filtro do tipo caixa.

$$f(\mathbf{x}) = \bar{f}(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x}), \quad (2.1.6)$$

No qual a variável filtrada e dada por

$$\bar{f}(\mathbf{x}) = \int f(\mathbf{x}')F(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (2.1.7)$$

em que F é o filtro LES, se determina como

$$F(\mathbf{x}) = F(x_1, x_2, x_3) = \begin{cases} 1/\Delta^3, & \text{se } |x_i| \leq \Delta, i = 1,2,3 \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.1.8)$$

onde $\Delta = \sqrt[3]{V_c}$ corresponde ao tamanho característico do filtro, (x_1, x_2, x_3) representa as coordenadas espaciais do vetor \mathbf{x} , e (V_c) é o volume de uma única célula da malha. Considerando que para os escoamentos de interesse há forte variação de densidade, é necessário aplicar a filtragem de Favre, na qual com base em tal processo de filtragem as equações de balanço (2.1.1)-(2.1.4) podem ser reescritas como:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \bar{S}_m^L, \quad (2.1.9)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}^{sgs}}{\partial x_j} + \bar{S}_{u,i}^L, \quad (2.1.10)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}_p \tilde{T}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{c}_p \tilde{T}}{\partial x_i} = -\frac{\partial (\bar{q}_i + q_i^{sgs})}{\partial x_i} + \frac{\partial [(\bar{\tau}_{ij} - \tau_{ij}^{sgs}) \tilde{u}_i]}{\partial x_j} + \overline{S_{c_p T}^L}, \quad (2.1.11)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k}{\partial x_i} = -\frac{\partial (\bar{J}_{k,i} + J_{k,i}^{sgs})}{\partial x_i} + \overline{S_k^L}, \quad (2.1.12)$$

onde sgs representa os termos sub-malha (SGS).

2.1.1.2 Modelagem de fechamento do tipo sub-malha para (LES)

Os modelos de fechamento propostos para a metodologia LES são conhecidos como modelos sub-malha e são responsáveis basicamente por modelar a interação entre as duas bandas do espectro originárias do processo de filtragem, ou seja, a interação entre as bandas de maiores estruturas turbilhonares com as de menores (NETO, 2020).

O modelo sub-malha de fechamento mais popular foi proposto por (SMAGORINSKY, 1963), e foi desenvolvido com base na hipótese de (BOUSSINESQ, 1877), no qual o tensor taxa de deformação de sub-malha não resolvido τ_{ij}^{sgs} e dado da seguinte forma (FERZIGER; PERIĆ; STREET, 2002; POINSOT; VEYNANTE, 2005):

$$\tau_{ij}^{sgs} - \frac{\delta_{ij}}{3} \tau_{kk}^{sgs} = \mu_{sgs} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) = 2\mu_{sgs} \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \tilde{S}_{kk} \right), \quad (2.1.13)$$

onde μ_{sgs} é a viscosidade de sub-malha ou turbulenta e \tilde{S}_{ij} o tensor taxa de deformação do campo resolvido. É interessante salientar que os termos sub-malha SGS não resolvidos presente nas equações filtradas recebem aqui um fechamento do tipo gradiente (LEBOISSETIER; OKONG'O; BELLAN, 2005).

No modelo de sub-malha dinâmico proposto por (GERMANO, 1992), com modificações propostas por (LILLY, 1992) a viscosidade turbulenta é determinada com base na hipótese do equilíbrio sendo dada por:

$$\mu_{sgs} = 2\bar{\rho} (C_s \Delta)^2 |\tilde{S}| = 2\bar{\rho} (C_s \Delta)^2 (2\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{1/2}, \quad (2.1.14)$$

no qual a constante C_s e determinada utilizando o procedimento dinâmico descrito em detalhes por (VEDOVOTO, 2011)

Os termos de difusão e de energia térmica sub-malha não resolvidos, q_i^{sgs} e $J_{k,i}^{sgs}$, são modelados com um tipo similar de gradiente para fechamento definido como:

$$q_i^{sgs} = -\bar{\rho} \frac{\mu_{sgs}}{Pr_t} \frac{\partial \widetilde{c_p T}}{\partial x_i}, \quad (2.1.15)$$

$$J_{k,i}^{sgs} = -\bar{\rho} \frac{\mu_{sgs}}{Sc_t} \frac{\partial \widetilde{Y}_k}{\partial x_i}, \quad (2.1.16)$$

onde Pr_t e Sc_t se referem aos números turbulentos de Prandtl e de Schmidt respectivamente.

Para mais detalhes envolvendo a modelagem matemática da fase euleriana, alguns trabalhos desenvolvidos no MFLab podem ser consultados tais como (VEDOVOTO, 2011), (MELO et al., 2017), (DAMASCENO et al., 2018) e (PINHEIRO et al., 2022).

2.1.2 Fase discreta

A modelagem de dispersão, aquecimento e evaporação de gotas é aqui apresentadas, considerando que as gotas são constituídas por uma única espécie dominante e nenhum gradiente de temperatura em seu interior é considerado. Tal modelo é conhecido como modelo de condutividade térmica infinita (ITC) e foi primeiramente apresentado por (ABRAMZON; SIRIGNANO, W., 1989). As inclusões propostas para a computação dos gradientes de temperatura e concentração são apresentadas no próximo capítulo com mais detalhe.

2.1.2.1 Equações de transporte da gota

Para a modelagem envolvendo sistemas de pulverização líquida em um ambiente fechado aquecido, o spray é considerado a fase discreta do domínio formada por um grande número de partículas que são transportadas com base na segunda lei de Newton (LI, C.; CRUA; VOGIATZAKI, 2019). Logo, sob a formulação do tipo lagrangiana para tal fase, as equações de movimento e quantidade de movimento linear da gota são expressas como:

$$\frac{dx_{d,i}}{dt} = u_{d,i}, \quad (2.1.17)$$

$$m_d \frac{du_{d,i}}{dt} = \sum F_{d,i} = \frac{u_i - u_{d,i}}{\tau_d} + g_i, \quad (2.1.18)$$

onde $x_{d,i}$ e $u_{d,i}$ correspondem respectivamente a posição e a velocidade da gota, u_i se refere à velocidade da fase carreadora do gás, e g_i o campo gravitacional. Note que a variação mássica da gota é negligenciada na [2.1.18](#). O tempo característico de relaxação da gota, τ_d , é dado por:

$$\tau_d = \frac{4 \rho_l}{3 \rho_g} \frac{D_d}{C_D |u_i - u_{d,i}|}, \quad (2.1.19)$$

onde ρ_l e ρ_g se referem respectivamente às densidades da gota líquida e da fase gás circundante respectivamente e $|u_i - u_{d,i}|$ a velocidade de escorregamento.

Para a determinação do coeficiente de arrasto C_D , correlações semi-empíricas são estabelecidas. Neste trabalho a correlação proposta por [\(FENG; MICHAELIDES, E. E., 2001\)](#) para esferas viscosas é utilizada, no qual λ se refere neste caso a razão μ_l/μ_g . Na literatura muitas são as soluções do tipo analítica e numérica estabelecidas, que vão desde esferas sólidas ($\lambda \rightarrow \infty$) ate bolhas inviscidas ($\lambda \rightarrow 0$) [\(CLIFT; GRACE; WEBER, 2005; MICHAELIDES, E., 2006\)](#). Entretanto poucos são os trabalhos que levam em consideração a importância do escoamento interno presente em esferas viscosas para a determinação da força fluidodinâmica envolvida. Tais correlações utilizadas neste trabalho são definidas para diferente intervalos de Reynolds conforme segue:

$$C_D = \frac{8}{Re_d} \frac{3\lambda + 2}{\lambda + 1} \left(1 + 0.05 \frac{3\lambda + 2}{\lambda + 1} Re_d \right) - 0.01 \frac{3\lambda + 2}{\lambda + 1} Re_d \ln(Re_d), \quad \text{se } 0 \leq Re_d \leq 5, \quad (2.1.20)$$

onde o número de Reynolds da gota, Re_d é definido como:

$$Re_d = \frac{\rho_g D_d |u_i - u_{d,i}|}{\mu_g}. \quad (2.1.21)$$

$$C_D = \begin{cases} \frac{2-\lambda}{2} C_{D,0} + \frac{4\lambda}{6+\lambda} C_{D,2}, & \text{se } 5 < Re_d \leq 1000 \text{ e } 0 \leq \lambda \leq 2 \\ \frac{4}{\lambda+2} C_{D,2} + \frac{\lambda-2}{\lambda+2} C_{D,\infty}, & \text{se } 5 < Re_d \leq 1000 \text{ e } 2 \leq \lambda \leq \infty \end{cases}, \quad (2.1.22)$$

onde as funções $C_{D,0}$, $C_{D,2}$ e $C_{D,\infty}$ são determinadas da seguinte forma:

$$C_{D,0} = \frac{48}{Re_d} \left(1 + \frac{2.21}{\sqrt{Re_d}} - \frac{2.14}{\sqrt{Re_d}} \right), \quad (2.1.23)$$

$$C_{D,2} = 17.0 Re_d^{-2/3}, \quad (2.1.24)$$

e

$$C_{D,\infty} = \frac{24}{Re_d} \left(1 + \frac{1}{6} Re_d^{2/3} \right). \quad (2.1.25)$$

Onde finalmente,

$$C_D = 0.44 \text{ se } Re_d > 1000. \quad (2.1.26)$$

Para mais detalhes envolvendo a modelagem matemática das equações de movimento da gota, alguns trabalhos desenvolvidos no MFLab podem ser consultados tais como (PINHEIRO et al., 2018), (SANTOS et al., 2019) e (PINHEIRO et al., 2022).

2.1.2.2 Equações de aquecimento e evaporação da gota

Para o modelo de evaporação da gota, os processos de transferência de massa e energia envolvidos no fenômeno de evaporação são levados em conta, sendo logo descritos por equações diferenciais com as quais a temperatura e o tamanho da gota são previstos com o passar do tempo. A variação temporal da massa de uma gota é definida como:

$$\frac{dm_d}{dt} = -\dot{m}_d, \quad (2.1.27)$$

onde m_d e \dot{m}_d se referem respectivamente a massa e a taxa de evaporação da gota.

$$\frac{dD_d}{dt} = -\frac{2\dot{m}_d}{\pi \rho_l D_d^2}, \quad (2.1.28)$$

no qual D_d é o diâmetro da gota e ρ_l a densidade da gota.

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{\dot{Q}_s}{m_d c_l}, \quad (2.1.29)$$

onde T_d é a temperatura da gota, c_l calor específico da gota líquida, e \dot{Q}_s a potência transferida para promover a variação da energia térmica da gota por unidade de tempo, no qual é transferida na forma de calor latente.

Considerando o modelo proposto por (ABRAMZON; SIRIGNANO, W., 1989) a taxa de evaporação instantânea da gota é dada pela equação de Stefan-Maxwell, na qual ambos os fenômenos de difusão e advecção são computados:

$$\dot{m}_d = \pi D_d D_{v,m} \rho_m Sh_m \ln(1 + B_M), \quad (2.1.30)$$

$$\dot{Q}_s = \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \pi D_d Nu_m k_m (T_g - T_d) - L_v \dot{m}_d, \quad (2.1.31)$$

onde $D_{v,m}$ se refere ao coeficiente de difusividade de vapor, L_v o calor latente de evaporação, ρ_m a densidade, k_m a condutividade térmica. O sub-índice m representa que as propriedades físicas são estabelecidas na região de mistura ou filme (vapor-gás) presente ao redor da gota, Sh e Nu os números modificados respectivamente de Sherwood e Nusselt estabelecidos por (ABRAMZON; SIRIGNANO, W., 1989), B_M o número de transferência de massa de Spalding, B_T o número de transferência de energia térmica de Spalding e T_g a temperatura da fase gás carreadora. A forma de calcular tais parâmetros é apresentado no próximo capítulo.

Para mais detalhes envolvendo a modelagem de aquecimento e evaporação aqui descritas, alguns trabalhos desenvolvidos no MFLab podem ser consultados tais como (PINHEIRO et al., 2018), (PINHEIRO; VEDOVOTO, 2019) e (PINHEIRO et al., 2022) e (PINHEIRO; VEDOVOTO et al., 2019).

2.1.3 Acoplamento entre fases

A influência da fase carreadora do gás circundante nas gotículas líquidas pulverizadas são inferidas através de uma série de termos fontes através do método Particle-Source-In-Cell (PSI-Cell) (CROWE; STOCK; SHARMA, 1977). No qual tais termos fontes são definidos da seguinte forma:

$$S_m^L = \frac{1}{V_c} \sum_1^{n_d} \dot{m}_d, \quad (2.1.32)$$

$$S_{u,i}^L = \frac{1}{V_c} \sum_1^{n_d} \left[m_d \left(\frac{du_{d,i}}{dt} - g_i \right) + \dot{m}_d u_i \right], \quad (2.1.33)$$

$$S_{c_p,T}^L = \frac{1}{V_c} \sum_1^{n_d} \left[m_d \frac{d(c_l T_d)}{dt} - g_i - \dot{m}_d L_v \right], \quad (2.1.34)$$

$$S_k^L = \frac{1}{V_c} \sum_1^{n_d} \dot{m}_d \varepsilon_k, \quad (2.1.35)$$

onde ε é taxa de evaporação fracional das k -ésimas espécies, n_d é o número de gotas presentes em um determinado volume de célula euleriano V_c .

2.2 Metodologia numérica

O MFSim é uma plataforma de Modelagem e Simulação computacional, que possui como capacidade, a simulação de problemas complexos de escoamento turbulento multifásico através das metodologias LES ou URANS com processamento paralelo, utilizando como discretização o Método dos Volumes Finitos com malha bloco estruturada e refinamento adaptativo dinâmico baseado em gradientes de propriedades. Além disso, a plataforma permite que o acoplamento entre fases seja feito de maneira euleriana-euleriana ou euleriana-lagrangiana, além de usar o Multi-Direct Forcing como método de fronteira imersa. Tal ferramenta foi e

vem sendo desenvolvida integralmente pelo Laboratório de Mecânica dos Fluidos - MFLab-FEMEC-UFU em parceria com a empresa PETROBRAS e outros centros de pesquisa no Brasil e no exterior.

MODELAGEM DE AQUECIMENTO E DE EVAPORAÇÃO DE GOTA

Neste trabalho o modelo de evaporação utiliza como líquido multicomponente uma redução de oito espécies químicas de um combustível de aviação, mais especificamente o Jet A. Tal técnica discretiva do composto geralmente é empregada devido a extensa composição de espécies que normalmente combustíveis comerciais apresentam. Neste sentido o surrogate é definido através da seleção de uma quantidade pequena de componentes, capazes de, em mistura, servir como uma substituição do real combustível analisado (SAMIMI ABIANEH; CHEN, C., 2012).

Diversas são as simplificações presentes na literatura que propuseram uma técnica de tratamento para a quantidade extensa de espécies envolvendo tais multicomponentes usuais, uma vez que, a redução do número de variáveis seria capaz de garantir para a modelagem a diminuição do excessivo custo computacional atrelado.

Uma estratégia recente se trata do Modelo Multidimensional Quasi-Discreto sugerido por (ELWARDANY; SAZHIN, S., 2012; SAZHIN, S.; ELWARDANY et al., 2011) no qual se caracteriza por levar em conta as difusividades térmica e das espécies líquidas envolvidas como também ser projetado com capacidade para aportar uma grande quantidade de espécies constituintes, o que condiz com os combustíveis reais. Entretanto tal proposta se baseia na introdução de quasi-componentes com valores não inteiros de números de carbono que acabam por limitar modelagens que envolvam processos de ignição e de combustão em geral (SAZHIN, S. S., 2017).

A técnica utilizada neste trabalho foi implementada por (PINHEIRO et al., 2022) no MFSim e se trata do modelo de componentes discretos (DCM) no qual se caracteriza pela seleção de uma porção pequena, mas, ao mesmo tempo, representativa de componentes que constituem o combustível real. Tal modelo também inclui em sua computação os efeitos de difusividade térmica e de espécies líquidas envolvidas. Sendo também devido a sua ideia simplista de redução capaz de ser implementado para modelagens envolvendo processos de queima e de ignição, em geral.

Este capítulo possui como objetivo a apresentação da modelagem matemática como também do detalhamento numérico implementado envolvendo o aquecimento e a evaporação de gotas líquidas de combustível a partir do modelo de componentes discretos (DCM), no qual introduz como novidade um tratamento quanto a fase gás carreadora circundante no qual diferente do que era antes considerado, inclui agora em sua composição mais de uma espécie.

3.1 Modelagem matemática

Neste trabalho o modelo de componentes discretos (DCM) que é baseado na solução analítica das equações de transferência de energia térmica e de difusão de espécies químicas envolvidas em conjunto com o modelo do Abramzon-Sirignano são empregados para a análise do aquecimento e evaporação de gotas multicomponentes. É interessante salientar que o efeito de radiação térmica não foi considerado (ABRAMZON; SAZHIN, S., 2006), como também nenhum modelo de quebra de gotas, além disso, efeitos de colisão e coalescência são negligenciados (SAZHIN, S., 2014).

3.1.1 Taxa de evaporação

Para implementação no MFSim de tal modelagem, diferentes modelos de evaporação foram primeiramente analisados por (PINHEIRO; VEDOVOTO, 2019), seguida da seleção e implementação do modelo do Abramzon-Sirignano (ABRAMZON; SIRIGNANO, W., 1989), generalizado para gotas multicomponentes em (CONTINILLO; SIRIGNANO, W., 1989). Neste modelo, a taxa de evaporação da gota \dot{m}_d é dado como:

$$\dot{m}_d = \pi D_d D_{v,m} \rho_m S h_m \ln(1 + B_M), \quad (3.1.1)$$

onde D_d é o diâmetro da gota, D_v o coeficiente de difusividade de vapor, ρ se refere a densidade, Sh o número modificado de Sherwood proposto por (ABRAMZON; SIRIGNANO, W., 1989), B_M o número de transferência de massa de Spalding e o sub-índice m representa que as propriedades físicas são computadas nas condições de mistura gás-vapor na região filme ao redor da gota.

$$Sh_m = 2 + \frac{Sh_0 - 2}{F_M}, \quad (3.1.2)$$

$$F_M = (1 + B_M)^{0.7} \frac{\ln(1 + B_M)}{B_M}. \quad (3.1.3)$$

Para estimar o número modificado de Sherwood Sh_0 , a correlação empírica de Ranz-Marshall (RANZ, 1952), com a modificação proposta por (LI, J.; MASON, 2000) para altos valores de Reynolds é utilizada:

$$Sh_0 = \begin{cases} 2 + 0.6Re_m^{1/2}Sc_m^{1/3}, & \text{se } Re_m \leq 200 \\ 2 + 0.6Re_m^{1/2}Sc_m^{1/3} + 0.02Re_m^{0.8}Sc_m^{1/3}, & \text{se } 200 < Re_m \leq 1500 \\ 2 + 0.000045Re_m^{1.8}, & \text{se } Re_m > 1500. \end{cases} \quad (3.1.4)$$

onde Sc_m se refere ao número de Schmidt e Re_m ao número de Reynolds da gota:

$$Sc_m = \frac{\mu_m}{\rho_m D_{v,m}}, \quad (3.1.5)$$

$$Re_m = \frac{2\rho_g R_d |u_i - u_{d,k}|}{\mu_m}, \quad (3.1.6)$$

no qual μ é a viscosidade dinâmica da gota e $|u_i - u_{d,k}|$ representa a velocidade relativa gás-gota, também conhecida como slip velocity. Onde o número de massa de Spalding definido como:

$$B_M = \frac{\sum_k Y_{v,k_s} - \sum_k Y_{v,k_\infty}}{1 - \sum_k Y_{v,k_s}}, \quad (3.1.7)$$

onde Y_{v,k_s} e Y_{v,k_∞} são as fração mássica de vapor na superfície da gota e na fase carreadora do gás para cada componente k , respectivamente.

No estado de equilíbrio, a pressão parcial de cada componente k na superfície da gota p_{v,k_s} pode ser determinado por:

$$p_{v,k_s} = \gamma_i \chi_{l,k_s} p_{v,k}^* \quad (3.1.8)$$

onde γ_i se refere ao coeficiente de atividade da mistura, χ_{l,k_s} a fração molar do k -ésimo componente líquido presente na região de superfície da gota e p_{v,k_s} a pressão parcial de vapor do k -ésimo componente em estado puro ($\chi_{l,k_s} = 1$). Assumindo equilíbrio de fase na região de superfície da gota $p_{v,k}^* = p_{v,k}^{sat}$ e assumindo que para uma mistura de hidrocarbonetos, cujas estruturas moleculares são similares, se tem $\gamma_k \approx 1$, a Eq. (3.1.8) pode, pela lei de Raoult, ser simplificada para:

$$p_{v,k_s} = \chi_{l,k_s} p_{v,k}^* \quad (3.1.9)$$

A fração molar de vapor de cada componente k na superfície da gota χ_{v,k_s} é igual a razão entre a pressão parcial equivalente do elemento e a pressão ambiente p_g .

$$\chi_{v,k_s} = \frac{p_{v,k_s}}{p_g} \quad (3.1.10)$$

logo, uma vez que χ_{v,k_s} é determinado, Y_{v,k_s} pode ser dado como:

$$Y_{v,k_s} = \frac{\chi_{v,k_s} W_{v,k}}{\chi_{v,k_s} W_{v,k} + \chi_{g_s} \bar{W}} \quad (3.1.11)$$

sendo χ_{g_s} determinado pela relação:

$$\chi_{g_s} = 1 - \sum_k \chi_{v,k_s} \quad (3.1.12)$$

onde \bar{W} se refere ao peso molecular médio do gás que é dado por:

$$\bar{W} = \sum_j \chi_{g,j\infty} W_j. \quad (3.1.13)$$

onde $\chi_{g,j\infty}$ corresponde a fração molar do j-ésimo elemento gás presente na fase carreadora e W_j é o peso molecular do j-ésimo elemento gás.

Para computação das propriedades termodinâmicas e de transporte nas condições de mistura gás-vapor na região filme ao redor da gota, a regra empírica de 1/3 é utilizada (HUBBARD; DENNY; MILLS, 1975; YUEN; CHEN, L. W., 1976), na qual as condições de referência são dadas por:

$$T_m = T_s + \frac{1}{3}(T_g - T_s), \quad (3.1.14)$$

e,

$$Y_{v,k_m} = Y_{v,k_s} + \frac{1}{3}(Y_{v,k_g} - Y_{v,k_s}). \quad (3.1.15)$$

onde para a fase gás carreadora, as condições de referência são computadas como (TONINI; COSSALI, 2015):

$$\chi_{g,j_m} = \chi_{g,j_s} + \frac{1}{3}(\chi_{g,j\infty} - \chi_{g,j_s}) \quad (3.1.16)$$

Para determinação do coeficiente de difusividade da mistura $D_{v,m}$, presente em (3.1.1), a relação proposta por (WILKE; LEE, 1955) foi utilizada (POLING; PRAUSNITZ; O'CONNELL, 2001):

$$D_{v,m} = \frac{[3.03 - (0.98/M_{va}^{1/2})(10^{-7})(T^{3/2})]}{pM_{va}^{1/2}\sigma_{va}^2\Omega_D} \quad (3.1.17)$$

onde T se refere à temperatura, p à pressão.

$$M_{va} = 2[(1/M_v) + (1/M_a)]^{-1} \quad (3.1.18)$$

onde M_v e M_a se referem as massas molares médias envolvendo as espécies das fases de vapor e de gás respectivamente, $\sigma_{va} = (\sigma_v + \sigma_a)/2$, sendo σ_v e σ_a os comprimentos característicos de Lennard-Jonnes de cada especie da fase vapor e de gás, respectivamente, Ω_D a função de temperatura normalizada $T^* = k_b T / \varepsilon_{va}$ dada por Eq.(B6) em (SAZHIN, S.; KRISTYADI et al., 2006), $\varepsilon_{va} = \sqrt{\varepsilon_v \varepsilon_a}$, sendo ε_v e ε_a as energias características de Lennard-Jones de cada espécie da fase vapor e de gás, respectivamente e k_B a constante de Boltzmann.

Os valores de σ_{va} e ε_{va}/k_B computados para as espécies de ambas as fases de vapor e gás foram retirados do Software de código aberto Cantera (GOODWIN; MOFFAT; SCHOEGL et al., 2022).

Para a estipulação dos parâmetros médios de mistura (massa molar e relações de Lennard-Jones) as concentrações molares relativas de cada conjunto foram levadas em conta $(\chi_{g,j_m} / \sum_j \chi_{g,j_m})$ ou $(\chi_{v,k_m} / \sum_k \chi_{v,k_m})$ (SAZHIN, S. S.; ELWARDANY et al., 2010).

Os valores de σ_{va} e $\varepsilon_{v,a}/k_b$ para todos os elementos vapor são dados em Tab. 3.1 (GOODWIN; MOFFAT; SCHOEGL et al., 2022).

Especies vapor	$\sigma_{v,a}(A)$	$\varepsilon_{v,a}/k_b(K)$
n-octane	6.270	612.840
n-decane	6.690	704.920
n-dodecane	7.060	789.160
n-tetradecane	7.480	857.180
n-hexadecane	7.730	938.920
2-methylheptane	6.240	596.060
2-methylundecane	7.120	833.780
toluene	5.549	450.000
mesitylene	5.960	523.600

Tabela 3.1: Os comprimentos e energias características de Lennard–Jones para todas as espécies vapor.

Com relação a composição da mistura gasosa inerte considerada os valores de σ_{va} e $\varepsilon_{v,a}/k_b$ para todos os elementos gás são dados em Tab. 3.2 (GOODWIN; MOFFAT; SCHOEGL et al., 2022).

Especies gás	$\sigma_{v,a}(A)$	$\varepsilon_{v,a}/k_b(K)$
air	3.711	78.600
argon	3.330	136.500
carbon dioxide	3.760	244.000
methane	3.750	141.400
water	2.600	572.400
nitrogen	3.620	97.530

Tabela 3.2: Os comprimentos e energias características de Lennard–Jones para todas as espécies gás.

A mistura gasosa air foi tratada neste trabalho como um único elemento, no qual a concentração molar relativa χ_{g_m} é dada simplesmente por:

$$\chi_{g_m} = 1 - \sum_k \chi_{v,k_m}, \quad (3.1.19)$$

Neste contexto este trabalho apresenta uma modelagem multicomponentes de gotículas com relação a uma solução gasosa definida termodinamicamente por propriedades medias correlacionadas.

3.1.2 Aquecimento convectivo

O processo de aquecimento das gotas líquidas de combustível é descrito pela equação unidimensional de condução térmica em regime transiente para a temperatura $T \equiv T(t, R)$ pela seguinte relação diferencial (KARTASHOV, 2001; CARSLAW; JAEGER, 1986) em coordenadas esféricas, no qual as condições de simetria esférica e de velocidade nula no interior da gota $u_R = u_\theta = u_\phi = 0$ são consideradas:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k_l}{\rho_l c_{pl}} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial T}{\partial R} \right), \quad (3.1.20)$$

onde T é a temperatura da gota, R a coordenada radial, t o tempo e k_l , ρ_l , e c_{pl} se referem respectivamente as propriedades constantes condutividade térmica, densidade e calor específico da fase líquida, sendo esta ultima indicada neste caso pelo sub-índice l .

A Eq.(3.1.20) é resolvida com base na seguinte condição inicial:

$$T(R) |_{t=0} = T_0, \quad (3.1.21)$$

em conjunto com a condição contorno de Robin na região de superfície da gota, dado por:

$$h(T_{\text{eff}} - T_s) = k_l \frac{\partial T}{\partial R} |_{R=R_d-0}, \quad (3.1.22)$$

onde $T_{\text{eff}} = T_{\text{eff}}(t)$ e a temperatura efetiva que leva em conta o efeito de evaporação da gota ao invés de considerar somente a temperatura da fase carreadora do gás T_g , $T_s = T_s(t)$ e a temperatura da superfície da gota em $R = R_d$, e h o coeficiente convectivo de transferência de energia térmica.

$$T_{\text{eff}} = T_g + \frac{\dot{m}_d L_v}{4\pi R_d^2 h}, \quad (3.1.23)$$

e

$$h = \frac{Nu^* k_g}{2 R_d}, \quad (3.1.24)$$

no qual Nu se refere ao número de Nusselt.

$$Nu^* = Nu_m \frac{\ln(1.0 + B_T)}{B_T}, \quad (3.1.25)$$

onde B_T e o número de transferência de energia térmica de Spalding:

$$B_T = (1 + B_M)^\varphi - 1, \quad (3.1.26)$$

onde,

$$\varphi = \left(\frac{c_{p_v}}{c_{p_g}} \right) \left(\frac{Sh_m}{Nu_m} \right) \frac{1}{Le_m}, \quad (3.1.27)$$

onde Le_m e o número de Lewis definido por:

$$Le_m = \frac{k_m}{c_{p_m} D_{v,m} \rho_m}, \quad (3.1.28)$$

e

$$Nu_m = 2 + \frac{Nu_0 - 2}{F_T}. \quad (3.1.29)$$

Assim como estimado para Sh_0 , a mesma correlação empírica dada por 3.1.4 pode ser utilizada para determinação de Nu_0 :

$$Nu_0 = \begin{cases} 2 + 0.6Re_m^{1/2}Pr_m^{1/3}, & \text{se } Re_m \leq 200 \\ 2 + 0.6Re_m^{1/2}Pr_m^{1/3} + 0.02Re_m^{0.8}Pr_m^{1/3}, & \text{se } 200 < Re_m \leq 1500 \\ 2 + 0.000045Re_m^{1.8}, & \text{se } Re_m > 1500. \end{cases} \quad (3.1.30)$$

onde Pr e o número de Prandtl:

$$Pr_m = \frac{\mu_m c_{p_m}}{k_m}, \quad (3.1.31)$$

e

$$F_T = (1 + B_T)^{0.7} \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T}. \quad (3.1.32)$$

Assumindo h constante, a solução analítica da Eq. 3.1.20 e definida como (SAZHIN, S., 2014):

$$T(r, t) = \frac{1}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \left(I_n - \frac{\sin \lambda_n \zeta}{\lambda_n^2} \right) \frac{\exp(-k \lambda_n^2 t)}{b_n} - \frac{\sin \lambda_n}{b_n \lambda_n^2} \int_0^t \frac{d\zeta(\tau)}{d\tau} \exp(-k \lambda_n^2 (t - \tau)) d\tau \right\} \sin(\lambda_n r) + T_{\text{eff}}, \quad (3.1.33)$$

onde $r = R/R_d$ se refere a coordenada radial normalizada que parte do centro da gota, λ_n são as raízes positivas da seguinte equação rearranjada na seguinte forma:

$$\lambda \cos \lambda + j \sin \lambda = 0, \quad (3.1.34)$$

$$b_n = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{j}{j^2 + \lambda_n^2} \right), \quad (3.1.35)$$

e,

$$I_n = \int_0^1 r T_0(r) \sin(\lambda_n r) dr, \quad (3.1.36)$$

onde $T_0(r)$ se refere a distribuição inicial de temperatura no interior da gota ou a distribuição prevista no passo de tempo anterior no qual:

$$k = \frac{k_l}{c_{pl} \rho_l R_d^2}, \quad (3.1.37)$$

$$\zeta = \frac{h T_{\text{eff}} R_d}{k_l}, \quad (3.1.38)$$

e,

$$j = \frac{h R_d}{k_l} - 1. \quad (3.1.39)$$

Para a solução analítica apresentada em Eq.(3.1.33), temos que o seguinte termo (3.1.40) apresenta uma contribuição negligenciavelmente pequena (RYBDYLOVA et al., 2016).

$$\frac{\sin \lambda_n}{b_n \lambda_n^2} \int_0^t \frac{d\zeta(\tau)}{d\tau} \exp(-k \lambda_n^2 (t - \tau)) d\tau \quad (3.1.40)$$

Logo a Eq.(3.1.33) pode ser reduzida para a forma:

$$T(r, t) = \frac{1}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \left(I_n - \frac{\sin \lambda_n \zeta}{\lambda_n^2} \right) \frac{\exp(-k \lambda_n^2 t)}{b_n} \right\} \sin(\lambda_n r) + T_{\text{eff}}, \quad (3.1.41)$$

O aquecimento de uma gota parada em relação a um gás ambiente de alta temperatura ocorre basicamente de forma unidimensional no espaço, tornando possível, portanto, a consideração única do mecanismo de condução com relação ao processo de transferência de energia envolvida. Logo a solução da Eq.(3.1.20) definida analiticamente segundo Eq.(3.1.33) é empregada. Entretanto para uma gotícula que esteja com uma certa velocidade ambos os processos de condução e advecção devem ser levados em conta, sendo, portanto, necessário

segundo (TALLEY; YAO, 1988) a substituição da condutividade térmica líquida K_l pela efetiva k_{eff} determinada pela seguinte forma:

$$k_{\text{eff}} = \chi k_l, \quad (3.1.42)$$

onde o coeficiente χ varia de 1 ($Pe_l < 10$) até 2.72 ($Pe_l > 500$), podendo ser aproximado por:

$$\chi = 1.86 + 0.86 \tanh \left(2.225 \log \frac{Pe_l}{30} \right), \quad (3.1.43)$$

no qual o número de Peclet Pe_l é dado conforme:

$$Pe_l = Re_l Pr_l, \quad (3.1.44)$$

com,

$$Re_l = \frac{2\rho_l R_d U_{s,\text{max}}}{\mu_l}, \quad (3.1.45)$$

e

$$Pr_l = \frac{\mu_l c_{pl}}{k_l}, \quad (3.1.46)$$

onde $U_{s,\text{max}}$ se refere a máxima velocidade na superfície da gota, definida como:

$$U_{s,\text{max}} = \frac{1}{32} |u_i| \frac{\mu_g}{\mu_l} Re_d C_F. \quad (3.1.47)$$

C_F se trata do coeficiente de arrasto por atrito para uma gota esférica evaporando:

$$C_F = \frac{12.69 Re_d^{2/3}}{1 + B_M}. \quad (3.1.48)$$

O modelo de evaporação multicomponente utilizado neste trabalho foi implementado por (PINHEIRO et al., 2022) no qual a solução analítica reduzida Eq.(3.1.41) foi incorporada, sendo durante a execução da rotina computacional, tal distribuição atualizada a cada passo de tempo.

3.1.3 Difusão de espécies

O fenômeno de difusão mássica das espécies presentes nas gotas líquidas de combustível e descrito em coordenadas esféricas pela equação de difusão de cada componente envolvido para a fração mássica $Y_{l,k}$ pela seguinte relação diferencial [8,191], no qual as condições de simetria esférica e de velocidade nula no interior da gota são consideradas.

$$\frac{\partial Y_{l,k}}{\partial t} = D_l \left(\frac{\partial^2 Y_{l,k}}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial Y_{l,k}}{\partial R} \right). \quad (3.1.49)$$

onde $Y_{l,k}$ representa a fração mássica da fase líquida para as k-ésimas especies envolvidas, D_l o coeficiente de difusividade da mistura referente aos k-ésimos componentes, e k_l , ρ_l , e c_{pl} se referem respectivamente as propriedades constantes condutividade térmica, densidade e calor específico da fase líquida, sendo esta ultima indicada neste caso pelo sub-índice l , na qual a Eq.(3.1.49) é resolvida com base na seguinte condição inicial:

$$Y_{l,k}(R) |_{t=0} = Y_{l,k0}, \quad (3.1.50)$$

e de contorno dado pela seguinte relação:

$$D_l \frac{\partial Y_{l,k}}{\partial R} |_{R=R_d} = \frac{\dot{m}_d}{4\pi \rho_l R_d^2} (Y_{l,ks} - \varepsilon_k), \quad (3.1.51)$$

onde $Y_{l,ks} = Y_{l,ks}(t)$ se refere a fração mássica líquida das k-ésimas especies na superfície da gota e ε_k e a taxa de evaporação fracional dada por:

$$\varepsilon_k = \frac{Y_{v,ks}}{\sum_i Y_{v,ks}}, \quad (3.1.52)$$

no qual o sub-índice v indica a fase de vapor. Claramente, $\sum_k \varepsilon_k = 1$.

A taxa de evaporação de cada espécie k envolvida pode ser dada segundo a seguinte relação:

$$\dot{m}_{d,k} = \varepsilon_k \dot{m}_d, \quad (3.1.53)$$

Assumindo R_d constante, a solução analítica da Eq.(3.1.49) é definida como (SAZHIN, S., 2014):

$$Y_{l,k}(r, t) = \varepsilon_k + \frac{1}{r} \left\{ \exp \left[D_l \left(\frac{\lambda_0}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{Y_0,k} - Q_{Y_0} \varepsilon_k] \sinh(\lambda_0 r) + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\exp \left[-D_l \left(\frac{\lambda_n}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{Y_n,k} - Q_{Y_n} \varepsilon_k] \sinh(\lambda_n r) \right] \right\}, \quad (3.1.54)$$

onde λ_0 e λ_n para $n \geq 1$ são soluções para as equações:

$$\tanh \lambda = -\frac{\lambda}{h_{Y_0}} \quad e, \quad \tan \lambda = -\frac{\lambda}{h_{Y_0}}, \quad (3.1.55)$$

$$h_{Y_0} = -\left(1 + \frac{\alpha_m R_d}{D_l}\right), \quad (3.1.56)$$

$$\alpha_m = \frac{|\dot{m}_d|}{4\pi \rho_l R_d^2}, \quad (3.1.57)$$

$$Q_{Y_n} = \begin{cases} -\frac{1}{\|v_{Y_0}\|^2} \frac{(1+h_{Y_0})\sinh\lambda_0}{\lambda_0^2}, & \text{quando } n = 0 \\ \frac{1}{\|v_{Y_n}\|^2} \frac{(1+h_{Y_0})\sinh\lambda_n}{\lambda_n^2}, & \text{quando } n \geq 1. \end{cases} \quad (3.1.58)$$

e,

$$q_{Y_n,k} = \frac{1}{\|v_{Y_n}\|^2} \int_0^1 r Y_{l,k_0}(r) v_{Y_n} dr, \text{ para } n \geq 0. \quad (3.1.59)$$

Y_{l,k_0} se refere a distribuição inicial das frações mássicas das espécies químicas presentes no interior da gota ou a respectiva distribuição prevista no passo de tempo anterior no qual:

$$v_{Y_n} = \begin{cases} \sinh(\lambda_0 r), & \text{quando } n = 0 \\ \sinh(\lambda_n r), & \text{quando } n \geq 1. \end{cases} \quad (3.1.60)$$

$$\|v_{Y_n}\|^2 = \begin{cases} -\frac{1}{2} \left[1 + \frac{h_{Y_0}}{h_{Y_0}^2 - \lambda_0^2} \right], & \text{quando } n = 0 \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{h_{Y_0}}{h_{Y_0}^2 + \lambda_n^2} \right], & \text{quando } n \geq 1. \end{cases} \quad (3.1.61)$$

Para uma gota com certa velocidade, ambos os efeitos de difusão e advecção devem ser contabilizados, neste sentido a distribuição das frações mássicas das espécies dada pela Eq. (3.1.54) ainda pode ser utilizada, uma vez que, realize a substituição do D_l pela difusividade efetiva D_{eff} :

$$D_{eff} = \chi D_l, \quad (3.1.62)$$

onde:

$$\chi = 1.86 + 0.86 \tanh \left(2.225 \log \frac{Pe_l}{30} \right), \quad (3.1.63)$$

no qual o número de Peclet Pe_l é dado como:

$$Pe_l = Re_l Sc_l, \quad (3.1.64)$$

com,

$$Sc_l = \frac{\mu_l}{\rho_l D_l}. \quad (3.1.65)$$

No modelo de evaporação multicomponente implementado por (PINHEIRO et al., 2022) e utilizado neste trabalho, a solução analítica dada pela Eq. (3.1.54) foi incorporada, sendo durante a execução da rotina computacional, tal distribuição atualizada a cada passo de tempo.

A generalização do aquecimento e evaporação para gotas multicomponentes em movimento e utilizado aqui, no qual são denominados modelos de difusividade-condutividade térmica efetiva (ETC-ED).

Para mais detalhes envolvendo a modelagem matemática da fase lagrangiana, alguns trabalhos desenvolvidos no MFLab devem ser consultados tais como (PINHEIRO et al., 2018), (PINHEIRO; VEDOVOTO et al., 2019), (PINHEIRO; VEDOVOTO, 2019) e (PINHEIRO et al., 2022).

3.2 Detalhamento numérico e computacional

A modelagem lagrangiana desenvolvida até aqui do processo de aquecimento e evaporação de gotas multicomponentes foi implementada por (PINHEIRO et al., 2022), utilizando-se a plataforma de Modelagem e Simulação Computacional MFSim (Simulador Multifásico). No qual para a execução de toda rotina computacional atrelada, uma máquina de processador do tipo Intel(R) Core(TM) i7-3612QM CPU @ 2.10 GH com um 100 MHz clock foi utilizada.

Tal rotina é descrita resumidamente conforme dado por:

Algoritmo - Aquecimento e evaporação de gota multicomponente

1: Inicialmente, as distribuições de temperatura e de frações mássicas das espécies no interior da gota são tidas como uniforme, e as frações molares iniciais de cada espécie envolvida e considerada. Para os próximos passos de tempo, as distribuições obtidas anteriormente são utilizadas.

2: Cálculo das pressões parciais das espécies na superfície da gota conforme dado por Eq. (3.1.9), e utilizando informações catalogadas de referência para cada componente.

- 3: Cálculo das taxas de evaporação das espécies envolvidas conforme dado por Eq. (3.1.9), e utilizando informações catalogadas de referência para cada componente.
- 4: Determinação das condições de referência para a região de mistura ou filme gás-vapor.
- 5: Cálculo das propriedades termodinâmicas e de transporte μ_m , ρ_m , $D_{v,m}$, k_m e c_{p_m} para a região de mistura, através da computação direta das equações de tal fase resumidas por (TROPEA; LEMOINE; ENSEM, s.d.) em conjunto com a ferramenta de código aberta Cantera.
- 6: Cálculo das propriedades termodinâmicas e de transporte μ_g , ρ_g , k_g e c_{p_g} para a região da fase gás carreadora, através da computação direta das equações de tal fase resumidas por (TROPEA; LEMOINE; ENSEM, s.d.) em conjunto com a ferramenta de código aberta Cantera.
- 7: Cálculo da propriedade termodinâmica c_{p_v} para a região da fase vapor, através da computação direta fornecida pela ferramenta de código aberta Cantera.
- 8: Cálculo das propriedades termodinâmicas e de transporte da gota μ_l , ρ_l , k_l , c_{p_l} e D_l com base nas equações apresentadas na seção (3.4) e através de informações catalogadas de referência para cada componente.
- 9: Cálculo dos números adimensionais, da taxa de evaporação total e da contribuição de cada espécie envolvida.
- 10: Cálculo da temperatura efetiva, k e ζ conforme Eqs. (3.1.23) e (3.1.37).
- 11: Cálculo da distribuição de temperatura no interior da gota conforme apresentado pela Eq. (3.1.41). Sendo as raízes da Eq. (3.1.34) determinadas através do método numérico de bissecção (KIUSALAAS, 2013).
- 12: Cálculo da temperatura média da gota através do método numérico de Simpson (KIUSALAAS, 2013).
- 13: Cálculo da distribuição de espécies no interior da gota conforme apresentado pela Eq. (3.1.54). Sendo as raízes da Eq. (3.1.55) determinadas através do método numérico de bissecção (KIUSALAAS, 2013).
- 14: Cálculo da composição média da gota através do método numérico de Simpson (KIUSALAAS, 2013).
- 15: Atualização do ρ_l em razão da nova temperatura média e de composição da gota encontradas.
- 16: Atualização do D_d utilizando o método de Runge-Kutta de ordem 4 (KIUSALAAS, 2013), levando em conta ambos os processos de evaporação e thermal swelling atrelado.
- 17: Retorna ao passo 1 e repete para o próximo passo de tempo toda a rotina novamente.

3.3 Composição do combustível Jet A reduzido

Para a modelagem e por fim implementação do aquecimento e da evaporação de gotículas líquidas de combustível, mais especificamente o Jet A, um conjunto reduzido de espécies foi selecionado como forma de representar o combustível real. Neste sentido, (PINHEIRO et al., 2022) selecionou 12 propostas de reduções desenvolvidas no decorrer da última década, entre 2010 e 2019, conforme apresentado em Tab.(3.3).

Tabela 3.3: Legenda da Tabela: tabela que resume o critério de correção do relatório.

Surrogates	Descricao	N. comp	Referencias
1	Dooley's 1st generation	3	(DOOLEY; WON; CHAOS et al., 2010)
2	Huber's surrogate	8	(HUBER; LEMMON; BRUNO, 2010)
3	Dooley's 2st generation	4	(DOOLEY; WON; HEYNE et al., 2012)
4	Kim's UM1	4	(KIM; MARTZ; VIOLI, 2014)
5	Kim's UM2	4	(KIM; MARTZ; VIOLI, 2014)
6	Improved Dooley's 1st gen.	3	(YU; JU; GOU, 2016)
7	Improved Dooley's 2st gen.	4	(YU; JU; GOU, 2016)
8	Won's 1st surrogate	3	(WON et al., 2017)
9	Won's 2st surrogate	3	(WON et al., 2017)
10	Won's 3st surrogate	4	(WON et al., 2017)
11	Won's 4st surrogate	9	(WON et al., 2017)
12	Jameel's surrogate	2	(JAMEEL et al., 2019)

Para a seleção do redutor mais apropriado, a similaridade entre as propriedades-chave de cada um com relação ao real Jet A é levada em conta. Nesta ideia, as 12 propostas de redução foram investigadas através do modelo de aquecimento e evaporação implementado no MFSim, sendo para os mesmos parâmetros de setagem de caso, cada uma validada, através de resultados experimentais descritos por (WANG, F. et al., 2018).

Com base nisso, os parâmetros tempo e taxa de evaporação da gota como também a máxima temperatura atingida por tal foi comparada em relação ao real combustível. Tendo como resultado a seleção da redução denominada Won's 4th surrogate, que apresenta em sua composição a presença de 9 espécies químicas.

Tabela 3.4: Legenda da Tabela: tabela que resume o critério de correção do relatório.

Comps	Formula	Nomes	ID
1	C_8H_{18}	n-octane	NC8H18
2	$C_{10}H_{22}$	n-decane	NC10H22
3	$C_{12}H_{26}$	n-dodecane	NC12H26
4	$C_{14}H_{30}$	n-tetradecane	NC14H30
5	$C_{16}H_{34}$	n-hexadecane	NC16H34
6	C_8H_{18}	iso-octane	IC8H18
7	$C_{12}H_{26}$	iso-dodecane	IC12H26
8	C_7H_8	toluene	C7H8
9	C_9H_{12}	1,3,5-trimethylbenzene	C9H12

Para mais detalhes envolvendo o combustível reduzido Won's 4th surrogate, alguns trabalhos como (WON et al., 2017) e (PINHEIRO et al., 2022) podem ser verificados.

3.4 Propriedades termodinâmicas e de transporte dos componentes

Durante a rotina computacional de aquecimento e evaporação de gotas multicomponentes, as propriedades termodinâmicas e de transporte da fase vapor de combustível e da fase gás carreadora, a viscosidade dinâmica μ , a densidade ρ , o coeficiente de difusividade D_v , a condutividade térmica k e o calor específico c_p , são obtidas pelas regras de mistura de cada fase representada em Tab.(3.5) em conjunto com a ferramenta de código aberta Cantera (GODWIN; MOFFAT; SPETH, 2017; SANJOSÉ, 2009; PERRIN, 2014).

Tabela 3.5: Leis de mistura utilizadas para a computação das propriedades termodinâmicas referentes à fase gasosa (PERRIN, 2014).

Propriedades físicas	Lei de mistura	Referências
Calor específico (c_p)	$Cp_v = \sum_i Y_i C p_i$	
Densidade (ρ)	$\rho_v = \left(\sum_i \frac{Y_i}{\rho_i} \right)^{-1}$	
Condutividade térmica (k)	$\lambda_v = \sum_i \frac{x_i \lambda_i}{\sum_j x_j A_{ij}}$ com $A_{ij} = \frac{\left(1 + (M_i \mu_i / (M_j \mu_j))\right)^{1/2} (M_i / M_j)^{1/4}}{(8(1 + M_i / M_j))^{1/2}}$	(WASSILJEWA, 1904)
Viscosidade dinâmica (μ)	$\mu_v = \sum_i \frac{x_i \mu_i}{\sum_j x_j A_{ij}}$ com $A_{ij} = \frac{\left(1 + (M_i \mu_i / (M_j \mu_j))\right)^{1/2} (M_i / M_j)^{1/4}}{(8(1 + M_i / M_j))^{1/2}}$	(WILKE, 1950)

As propriedades termodinâmicas e de transporte dos hidrocarbonetos líquidos presentes no combustível Jet A reduzido, a viscosidade dinâmica μ , a densidade ρ , a condutividade térmica k e o calor específico c_p , como também o calor latente de evaporação L_v , a pressão de vapor saturado P_{vs} , a temperatura crítica T_c e a própria pressão p são obtidas através de relações catalogadas conforme disposto em (YAWS, C. L.; GABBULA, 2003; YAWS, C. L., 2008; YAWS, C., 2009), sendo as propriedades computadas através da temperatura média da gota enquanto que para o calor latente de evaporação e a pressão de vapor saturado a temperatura na superfície da gota é utilizada.

Para o coeficiente de difusividade das espécies líquidas envolvidas, a aproximação de Wilke-Chang é utilizada (BIRD, 2002)

$$D_{l,k} = \frac{7.4 \times 10^{-15} \sqrt{M_l T}}{\mu_l V_{l,k}^{0.6}} \quad (3.4.1)$$

onde M_l é a massa molar média da mistura líquida:

$$M_l = \left[\sum_k \left(\frac{Y_{l,k}}{M_{l,k}} \right) \right]^{-1}, \quad (3.4.2)$$

$$V_{l,k} = \left(\frac{\sigma_{l,k}}{1.18} \right)^3, \quad (3.4.3)$$

onde $\sigma_{l,k}$ se refere ao comprimento de Lennard-Jones para o k-ésimo componente, em \AA (SILVA, C. M.; LIU; MACEDO, 1998):

$$\sigma_{l,k} = 0.17791 + 11.779 \left(\frac{T_{cr,k}}{p_{cr,k}} \right) - 0.049029 \left(\frac{T_{cr,k}}{p_{cr,k}} \right)^2, \quad (3.4.4)$$

onde $T_{cr,k}$ se refere as temperaturas críticas em K e as pressões críticas $p_{cr,k}$ em bar para os k-ésimos componentes.

As propriedades das misturas foram estimadas conforme (SAZHIN, S. S.; AL QUBEISSI et al., 2014):

$$L_v = \sum_k (\varepsilon_i L_i), \quad (3.4.5)$$

$$p_{v_s} = \sum_k (\chi_{l,k} p_{v,k_s}), \quad (3.4.6)$$

$$\rho_l = \left[\sum_k \left(\frac{Y_{l,k}}{\rho_{l,k}} \right) \right]^{-1}, \quad (3.4.7)$$

$$\ln \mu_l = \sum_k (\chi_{l,k} \ln \mu_{l,k}), \quad (3.4.8)$$

$$k_l = \left[\sum_k \left(\frac{Y_{l,k}}{k_{l,k}^2} \right) \right]^{-1/2}, \quad (3.4.9)$$

$$c_l = \sum_k (Y_{l,k} c_{l,k}), \quad (3.4.10)$$

e,

$$D_l = \sum_k (\chi_{l,k} D_{l,k}). \quad (3.4.11)$$

Para mais detalhes envolvendo a computação das propriedades termodinâmicas e de transporte dos componentes constituintes do surrogate, o trabalho de [\(PINHEIRO et al., 2022\)](#) deve ser consultado.

RESULTADOS

4.1 Análise do aquecimento e da evaporação de uma única gota multicomponente em um ambiente inerte (ar)

Nesta seção, é realizada uma análise da evaporação multicomponente de uma gota isolada em um ambiente inerte ar, com foco específico no contexto do spray. O objetivo é investigar o processo de evaporação levando em consideração a presença de múltiplas espécies gasosas presentes na atmosfera circundante, para isso diversos parâmetros considerados relevantes são verificados.

Logo, uma análise comparativa da evaporação de uma gota multicomponente em duas situações distintas é realizada. Na primeira situação, a gota é imersa em um ambiente inerte contendo apenas a espécie de nitrogênio. Já na segunda situação, o ambiente será enriquecido com mais espécies que fazem parte da composição do ar atmosférico real.

Sendo portanto tal gota representada fisicamente conforme dado por Fig 4.1.

Através dessa análise comparativa, espera-se obter insights valiosos sobre o impacto da composição do ambiente nas características de evaporação da gota multicomponente. Isso contribuirá para uma compreensão mais abrangente dos processos de evaporação e suas interações com diferentes espécies gasosas presentes no ambiente circundante.

Se considerarmos uma gota isolada em que o único processo que ocorre é a evaporação e, em seguida, trocarmos o ambiente de nitrogênio para o ar, é esperado que a taxa de evaporação aumente, como podemos verificar em Fig 4.2[b]. Isso acontece porque quando a gota

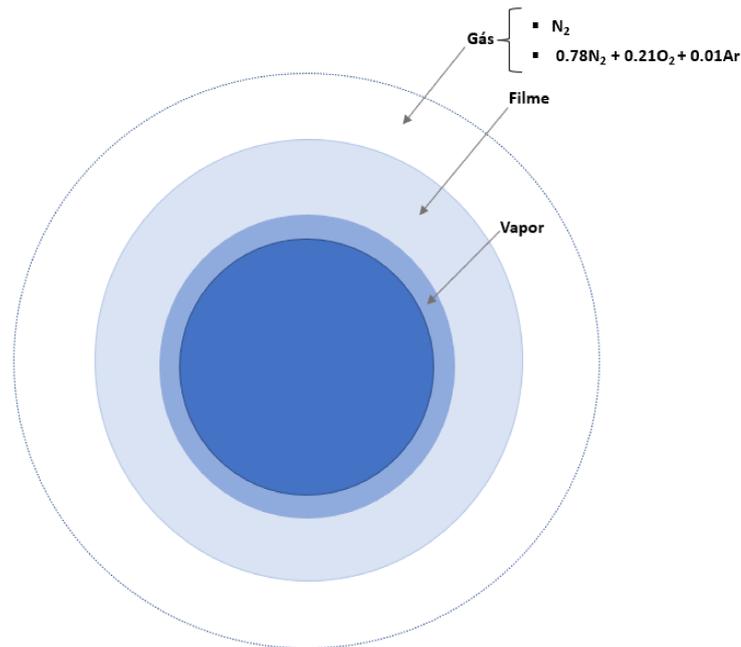


Figura 4.1: Representação física da gota simulada.

Situação	P(atm)	$d_o(\mu m)$	$T_{do}(K)$	$T_g(K)$	$U_{do}(m/s)$	Ambiente
1	10,0	300,0	300,0	1200,0	150,0	N_2
2	10,0	300,0	300,0	1200,0	150,0	ar

Tabela 4.1: Parâmetros iniciais de setagem para cada situação.

está no ambiente de nitrogênio, a evaporação ocorre apenas através da difusão das moléculas de nitrogênio na interface entre a gota e o ambiente. No entanto, quando o ambiente é trocado para o ar, a presença de outras espécies, como o oxigênio, pode acelerar o processo de evaporação. Como consequência, é de se esperar que, ao compararmos ambas as situações, a gota imersa em um ambiente de ar apresente um alcance maior de temperatura de superfície e uma evolução mais acentuada do diâmetro adimensional, como pode ser observado nas Figuras 4.2[a] e 4.2[d], respectivamente

No caso da gota, em relação ao coeficiente de difusividade, é de se esperar que a presença de outras espécies no ambiente, como no caso do ar em comparação com o nitrogênio, possa influenciar o coeficiente de difusão e, conseqüentemente, afetar a taxa de evaporação da gota. Em geral, o coeficiente de difusividade está relacionado à facilidade com que as moléculas de uma substância se movem através de um meio. A presença de diferentes componentes no ar, como oxigênio e outros gases, pode alterar as propriedades do meio e, portanto, influenciar o coeficiente de difusividade.

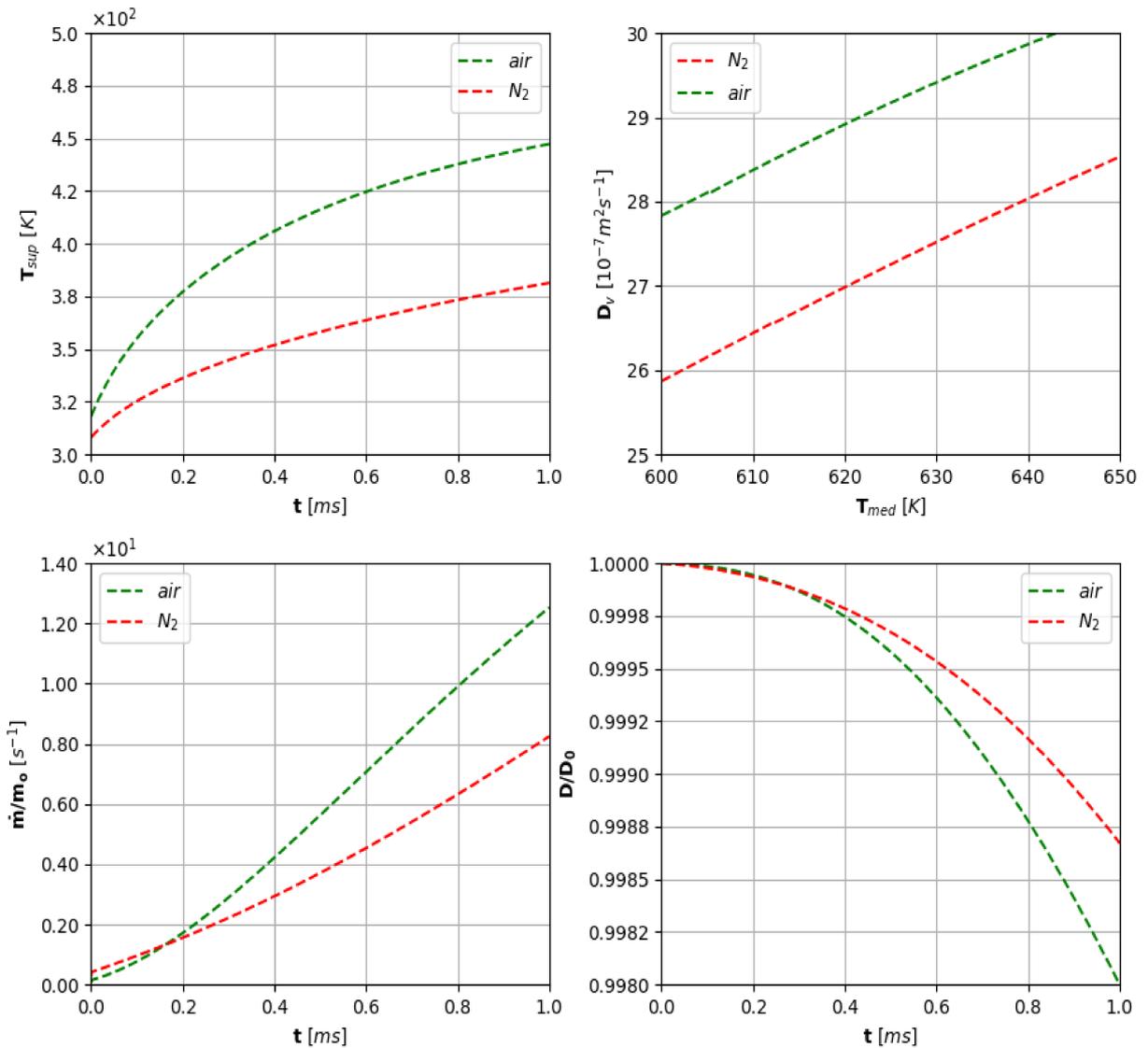


Figura 4.2: Parâmetros relevantes capturados temporalmente durante a simulação ([a] temperatura de superfície da gota [b] coeficiente de difusividade da mistura, [c] taxa de evaporação, [d] diâmetro adimensional)

Fazendo uma análise crítica, espera-se que o coeficiente de difusividade seja maior em um ambiente de ar em comparação com o nitrogênio. Isso ocorre devido à presença de várias espécies gasosas no ar, como oxigênio, nitrogênio, dióxido de carbono, entre outros, que têm diferentes características moleculares, como podemos verificar em 4.2[b]. Essa diversidade de espécies no ar proporciona maior probabilidade de colisões entre as moléculas, o que aumenta a eficiência da difusão. Além disso, as diferentes interações moleculares entre as espécies no ar podem facilitar a difusão dos componentes da gota. Em contraste, quando a gota está imersa em um ambiente contendo apenas nitrogênio, a difusão está restrita a essa única espécie

molecular, o que pode resultar em um coeficiente de difusividade menor em comparação com um ambiente de ar mais diversificado.

Resumidamente a difusividade de uma substância, que é uma medida de sua capacidade de difundir-se em um meio, é influenciada pela composição química do meio e pelas interações entre as moléculas. Quando um meio gasoso é diversificado, como o ar, é mais provável que a difusividade dos vapores da gota seja maior em comparação com um meio monocomponente, como o nitrogênio. No entanto, para esta interpretação é importante observar que nem todas as espécies químicas presentes no ar terão o mesmo efeito na difusividade dos vapores da gota. Alguns componentes do ar podem interagir mais favoravelmente com os vapores da gota, enquanto outros podem ter efeitos menos significativos. Portanto, a maior diversidade de espécies no ar é uma vantagem geral, mas a influência específica de cada espécie depende de suas propriedades químicas e das interações com os vapores da gota.

Além disso, em determinados casos, em ambientes altamente específicos ou com compostos químicos particulares, pode ocorrer um fenômeno conhecido como "segregação de espécies", em que as interações entre as moléculas podem levar a comportamentos diferentes da difusão, mesmo em um meio diversificado. Por isso, a previsão exata da difusividade em diferentes meios pode ser bastante complexa e requer uma análise detalhada das interações moleculares envolvidas.

Portanto, em termos gerais, para uma explicação mais detalhada com relação ao comportamento apresentado pelo coeficiente de difusividade dado em ambos os casos se faz necessária uma validação experimental atrelada.

4.2 Injeção spray em um ambiente gasoso aquecido

O Spray implementado por (PINHEIRO et al., 2022) é usado neste trabalho, para a inclusão de outras espécies na fase gás carreadora. O caso trata-se basicamente de um jato líquido de alta velocidade de diesel que é pulverizado em uma câmara retangular fechada cheia de uma mistura gasosa inerte com temperatura constante. Um esboço da geometria do domínio retangular é fornecido na Fig. 4.3. O caso foi simulado paralelamente utilizando uma malha adaptativa de 3 níveis físicos sendo a mais grosseira do tipo 64x16x16 nas direções x, y e z respectivamente.

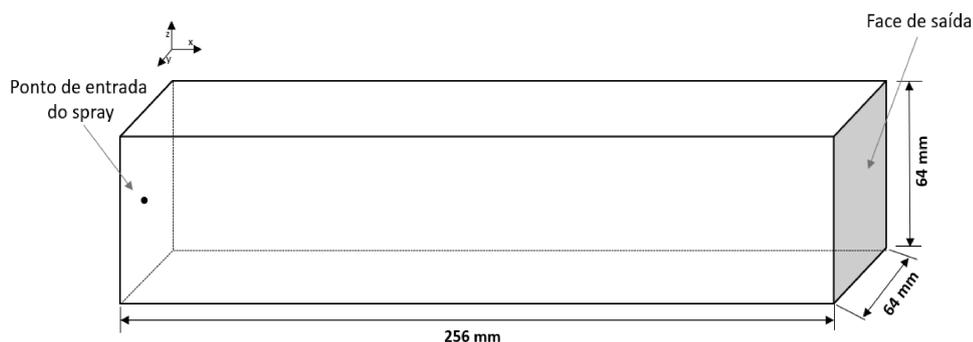


Figura 4.3: Vista do domínio retangular, onde o círculo preto no centro denota a localização do ponto de injeção.

Outras informações referentes aos parâmetros que envolvem o caso são exibidas na Tab. 4.2. Para uma verificação isolada do processo de evaporação, o caso foi simulado sem considerar nenhum modelo de quebra de gotas.

Parâmetro	Valor
Pressão ambiente [atm]	10,0
Temperatura ambiente [K]	1200
Taxa de fluxo de massa de injeção [g/s]	30,0
Diâmetro da gota [μm]	$300,0 \pm 50,0$
Temperatura da gota [K]	300,0
Velocidade de injeção da gota [m/s]	150,0
Diâmetro de injeção da gota [mm]	1,5

Tabela 4.2: Configurações de simulação para o spray.

As proporções definidas para cada espécie com relação a solução gasosa e líquida são apresentadas na Tab. 4.3.

Componentes	Formula molecular	Y_{gas}	Y_{liq}
Argônio	Ar	$1,55920 \times 10^{-5}$	
Dióxido de carbono	CO_2	$3,43520 \times 10^{-1}$	***
Metano	CH_4	$1,87840 \times 10^{-1}$	***
Água	H_2O	$1,40620 \times 10^{-1}$	***
Nitrogênio	N_2	$3,28000 \times 10^{-1}$	***
n-Octano	C_8H_{18}	***	$2,30000 \times 10^{-2}$
n-Decano	$C_{10}H_{22}$	***	$5,00000 \times 10^{-2}$
n-Dodecano	$C_{12}H_{26}$	***	$2,99000 \times 10^{-1}$
n-Tetradecano	$C_{14}H_{30}$	***	$1,00000 \times 10^{-1}$
n-Hexadecano	$C_{16}H_{34}$	***	$1,40000 \times 10^{-2}$
iso-Octano	IC_8H_{18}	***	$3,40000 \times 10^{-2}$
iso-Dodecano	$IC_{12}H_{26}$	***	$1,43000 \times 10^{-1}$
Tolueno	C_7H_{18}	***	$5,20000 \times 10^{-2}$
Mesitileno	C_9H_{12}	***	$2,85000 \times 10^{-1}$

Tabela 4.3: Frações mássicas de cada espécie envolvida.

A primeira análise do processo de evaporação para este caso foi realizada com base na verificação da temperatura do gás e das frações mássicas correspondentes de cada espécie ao longo de todo domínio, conforme apresentado a seguir nas Figs. 4.4 a 4.14.

Para a distribuição de temperatura capturada para o tempo Fig 4.4, foi possível verificar um comportamento esperado, em que se refere ao resfriamento da mistura gasosa devido à transferência térmica necessária para a vaporização das espécies de combustível injetadas. Isso ocorre porque durante a evaporação, as moléculas do líquido ganham energia suficiente para superar as forças de coesão e se transformar em vapor. Para fazer essa transição de fase, as moléculas do líquido precisam absorver energia térmica do ambiente ao seu redor.

Essa absorção de energia térmica ocorre através da transferência térmica entre as moléculas do líquido em evaporação e as moléculas do gás circundante. Como resultado, as moléculas do gás perdem energia térmica e, conseqüentemente, a temperatura da mistura é reduzida. Além disso é interessante salientar também a existência de um comprimento inicial (160 mm) no qual a gotículas de combustível ganham energia do tipo sensível com baixa taxa de vaporização atrelada. Desta maneira o resfriamento inicial intenso observado em grande parte se deve ao aquecimento sofrido pelas partículas líquidas injetadas.

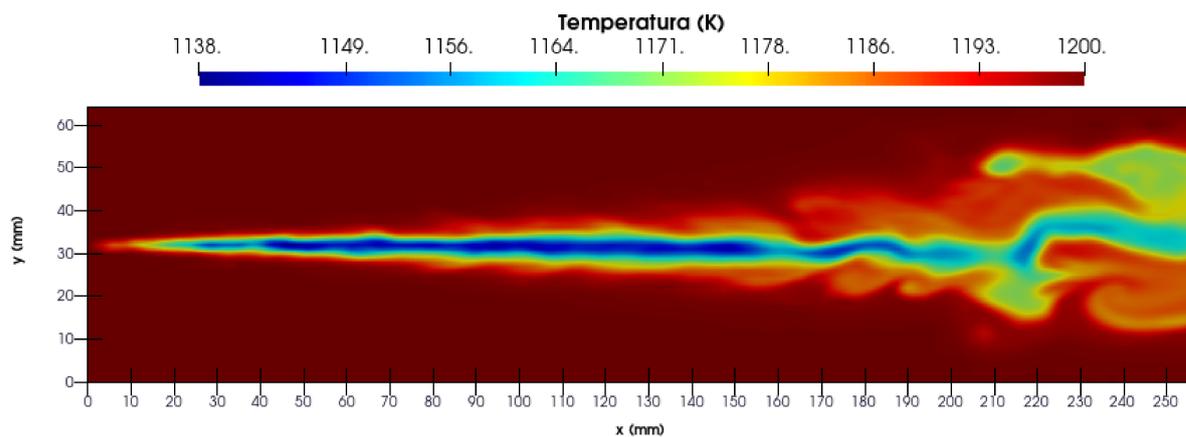


Figura 4.4: Distribuição de temperatura do gás ambiente em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms

Para a distribuição das frações mássicas de cada espécie gás capturada para o tempo, representado nas Figs. 4.5 a 4.8, foi possível verificar também um comportamento esperado. Com relação a todas espécies inseridas, a sua composição em questão se demonstra diminuir à medida que se aproxima do jato, além disso, quando presente de maneira representativa na mistura como, a água, o dióxido de carbono, o nitrogênio e o metano todos apresentam de maneira semelhante uma súbita queda na sua proporção à medida que o processo de evaporação se torna bastante intenso, como é possível de se verificar ao final do domínio para cada espécie.

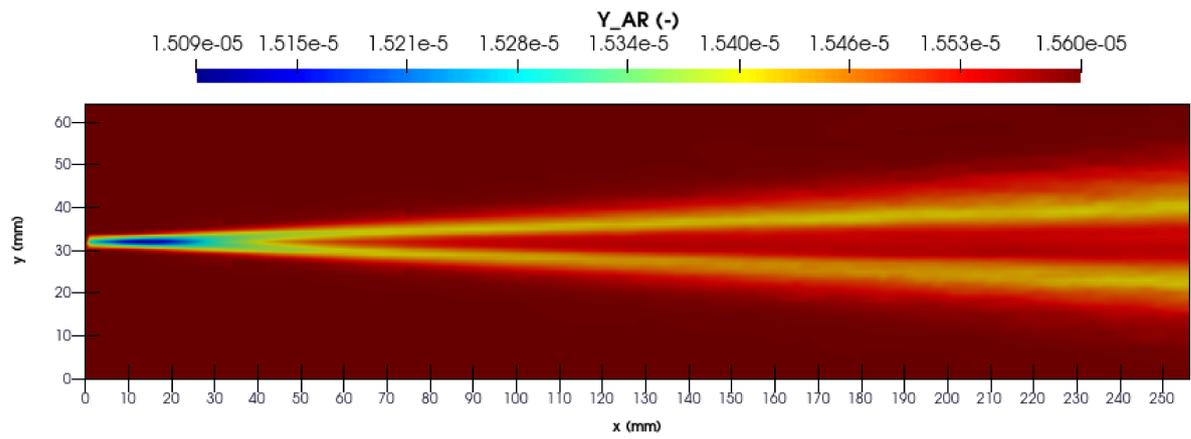


Figura 4.5: Distribuição da fração mássica de argônio em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms.

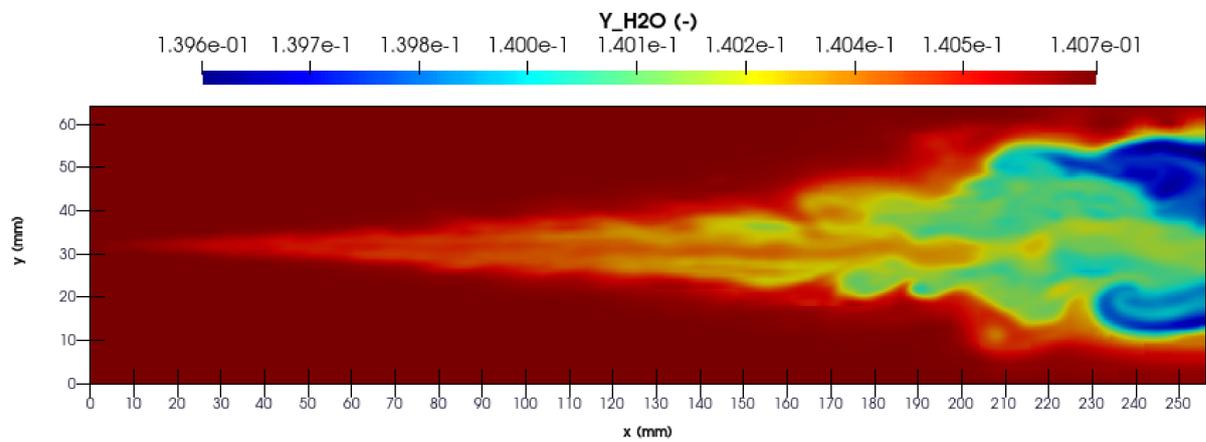


Figura 4.6: Distribuição da fração mássica de água em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms.

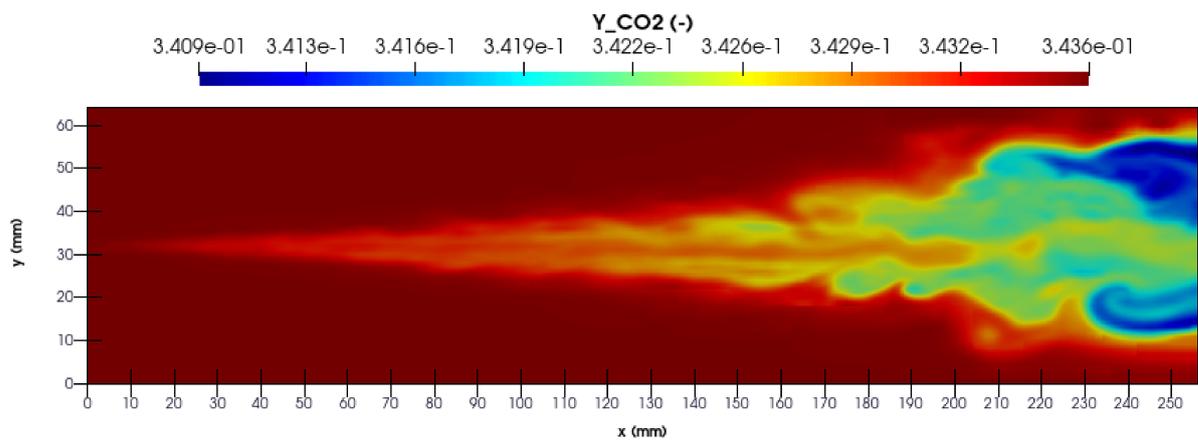


Figura 4.7: Distribuição da fração mássica de dióxido carbônico em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms.

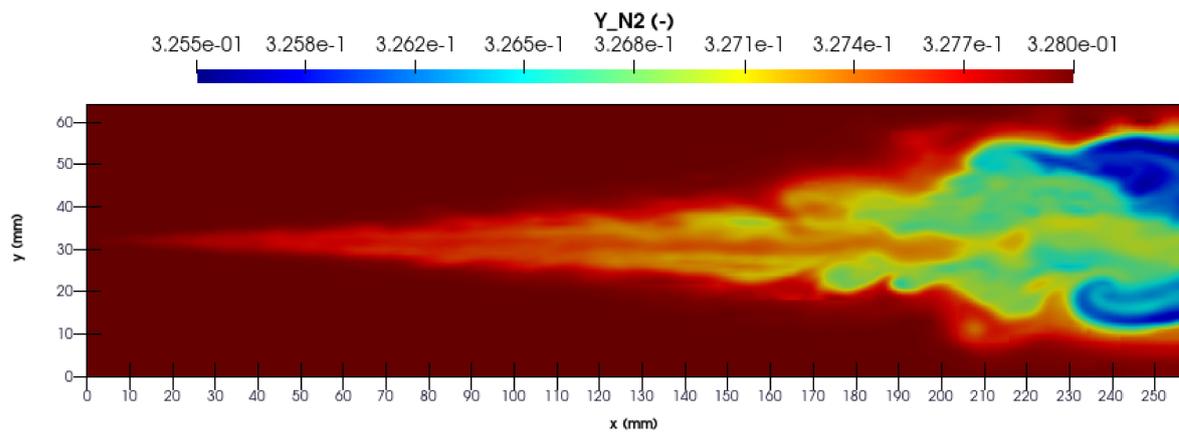


Figura 4.8: Distribuição da fração mássica do nitrogênio em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms.

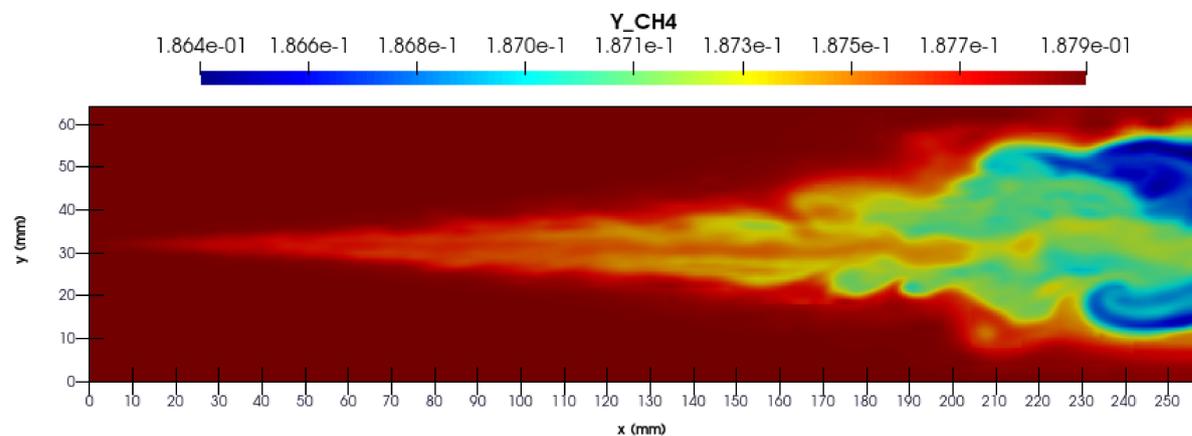


Figura 4.9: Distribuição da fração mássica do metano em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms.

Analisando as frações de cada espécie de combustível nas Figs. 4.10 a 4.18, verificamos também um comportamento esperado. Primeiramente o combustível se demonstra concentrado na linha de injeção, seguido da sua evolução em composição conforme o processo de evaporação se intensifica, tornando portanto mais concentrado no lado direito do domínio.

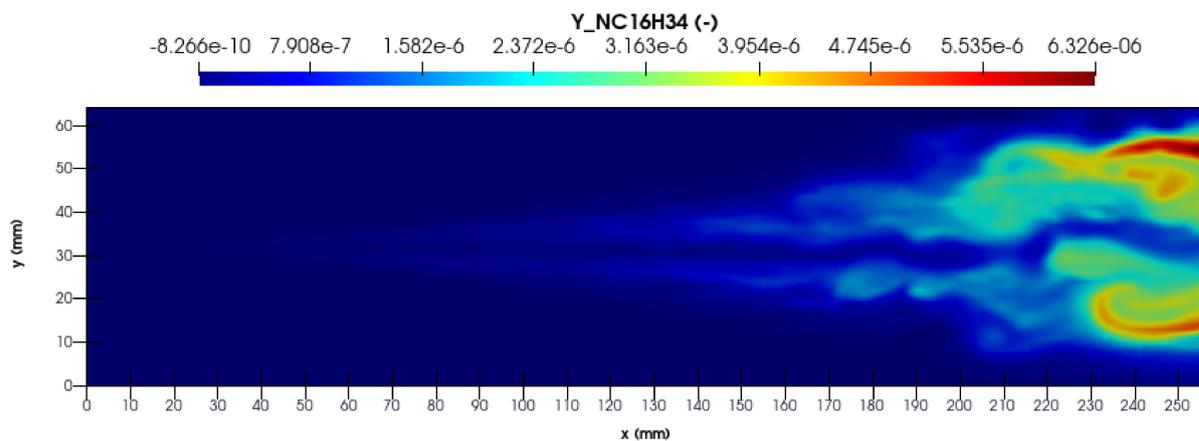


Figura 4.10: Distribuição da fração mássica do gás n-Hexadecano em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms.

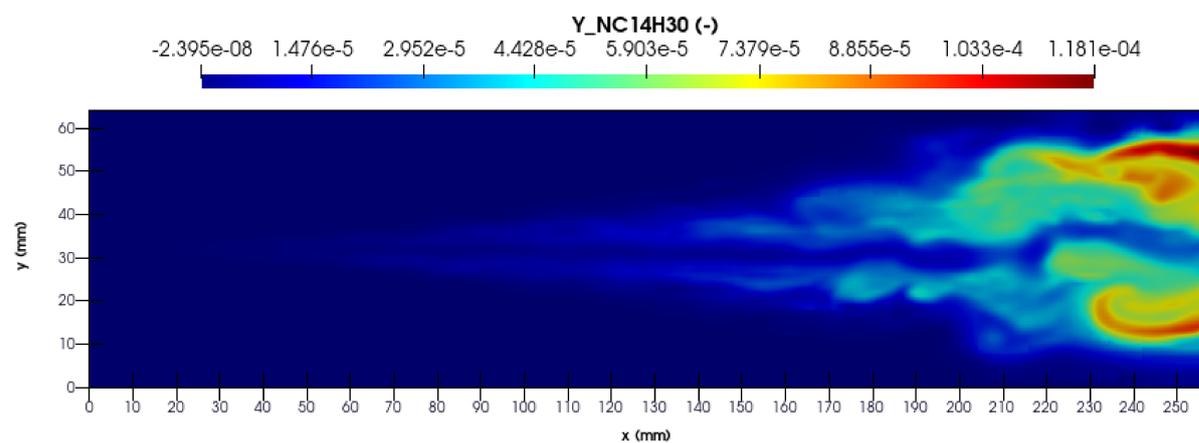


Figura 4.11: Distribuição da fração mássica do n-Tetradecano em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms.

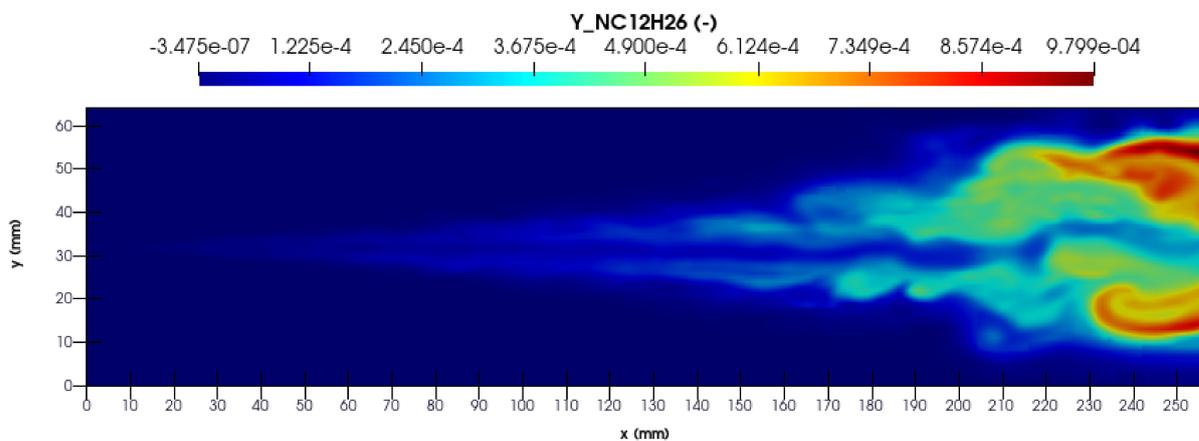


Figura 4.12: Distribuição da fração mássica do n-Dodecane em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms.

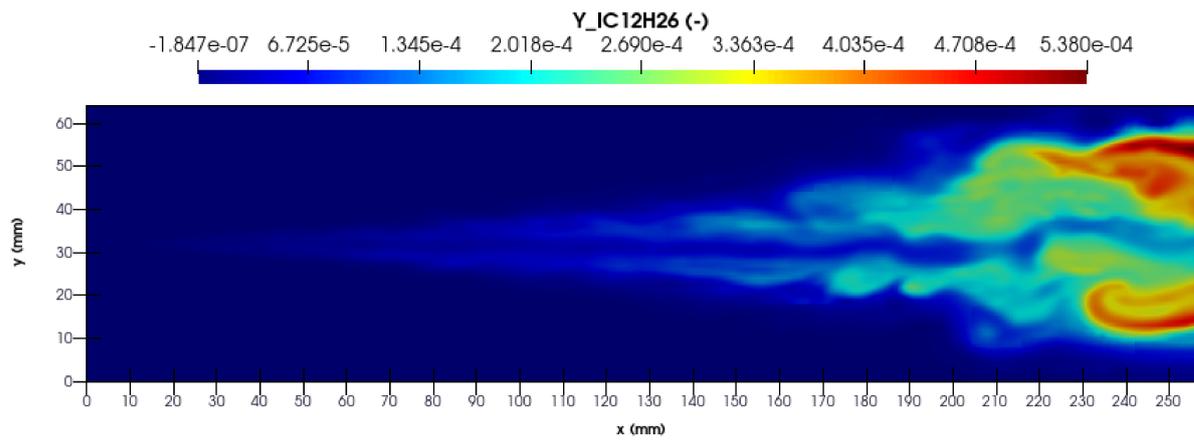


Figura 4.13: Distribuição da fração mássica do iso-Dodecano em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms.

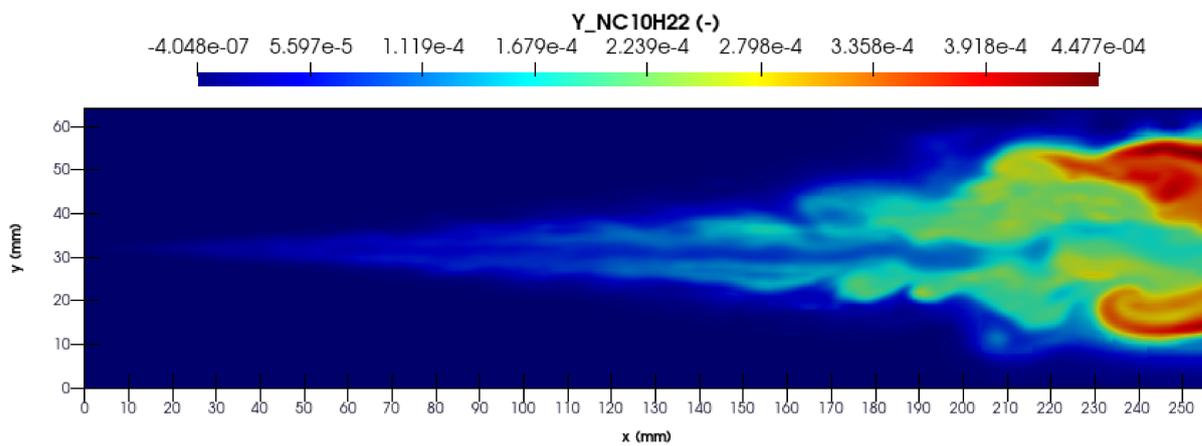


Figura 4.14: Distribuição da fração mássica do n-Decano em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms.

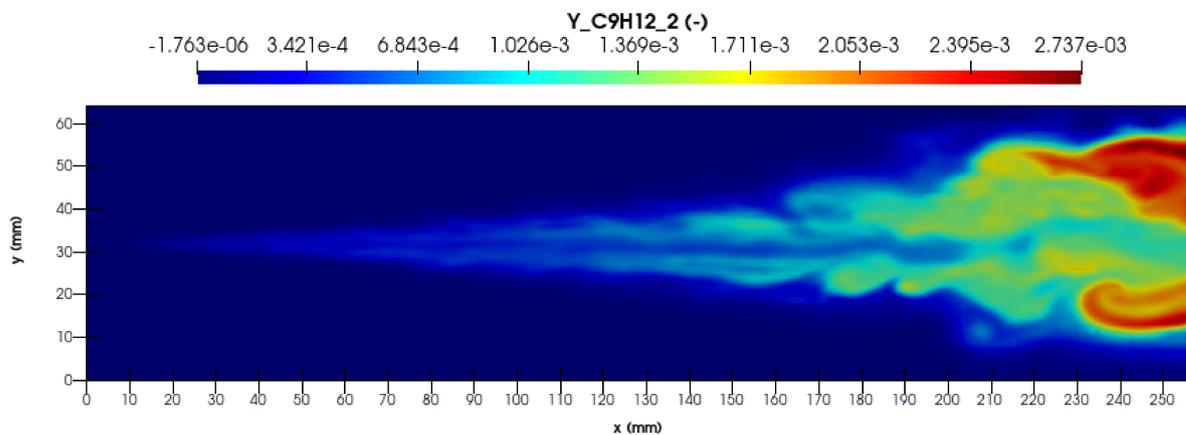


Figura 4.15: Distribuição da fração mássica do Mesityleno em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms.

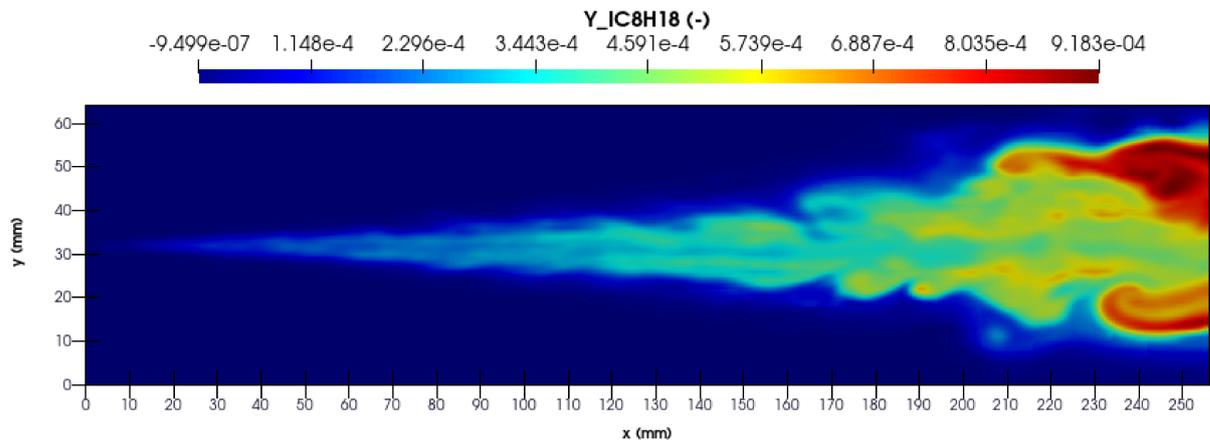


Figura 4.16: Distribuição da fração mássica do iso-Octano em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms.

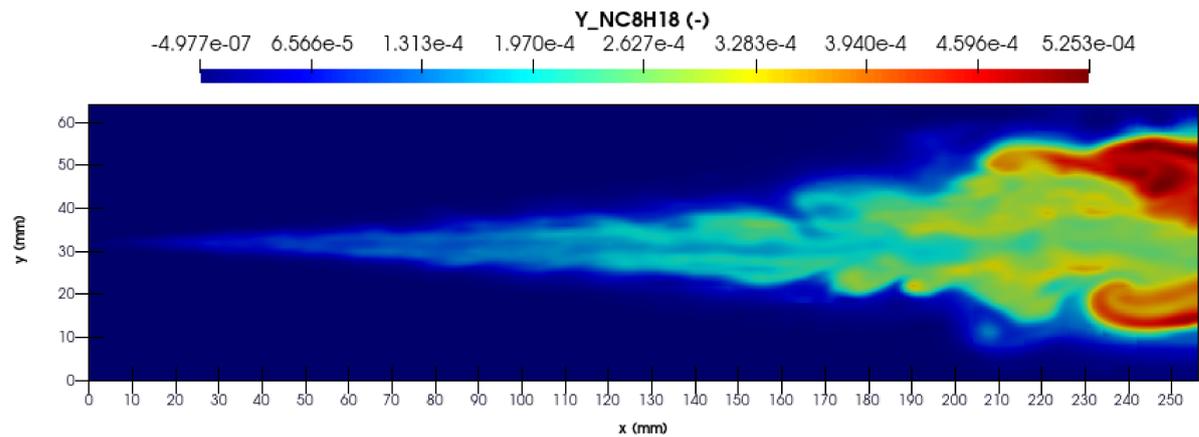


Figura 4.17: Distribuição da fração mássica do n-Octano em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms.

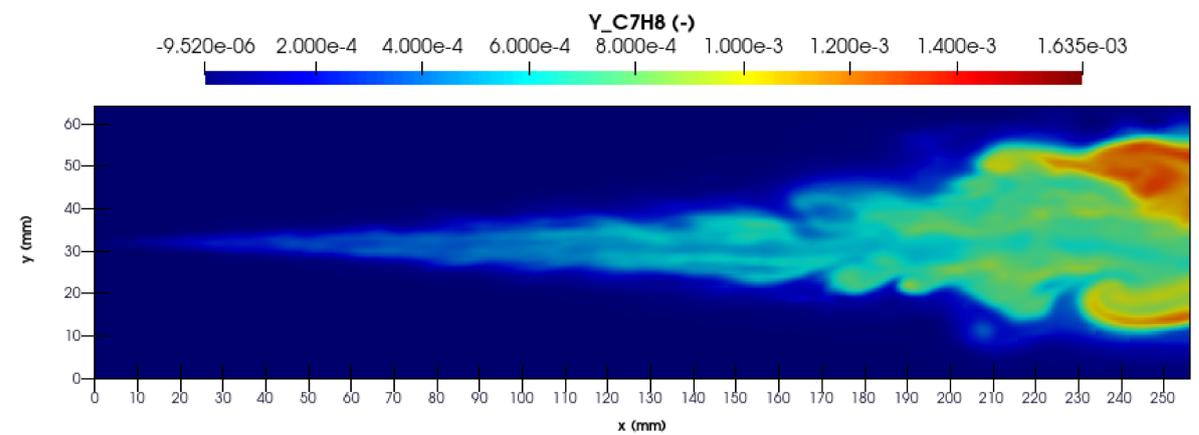


Figura 4.18: Distribuição da fração mássica do Tolueno em um plano médio do domínio no tempo 17,65 ms.

A segunda análise do processo de evaporação para este caso foi realizada com base na verificação da parte lagrangiana, conforme apresentado a seguir nas Figs. 4.19, 4.20.

Para a temperatura das partículas representado em Fig. 4.19 podemos pontuar a seguinte ocorrência. Durante o processo de evaporação, as partículas de combustível absorvem energia térmica das moléculas de gás circundantes para realizar a transição de fase do estado líquido para o estado gasoso.

Como consequência à medida que as partículas se misturam e interagem com as espécies gás, elas eventualmente absorvem energia térmica do gás circundante. Esse processo de absorção de energia térmica resulta em um aumento na temperatura das partículas conforme representado em Fig. 4.19.

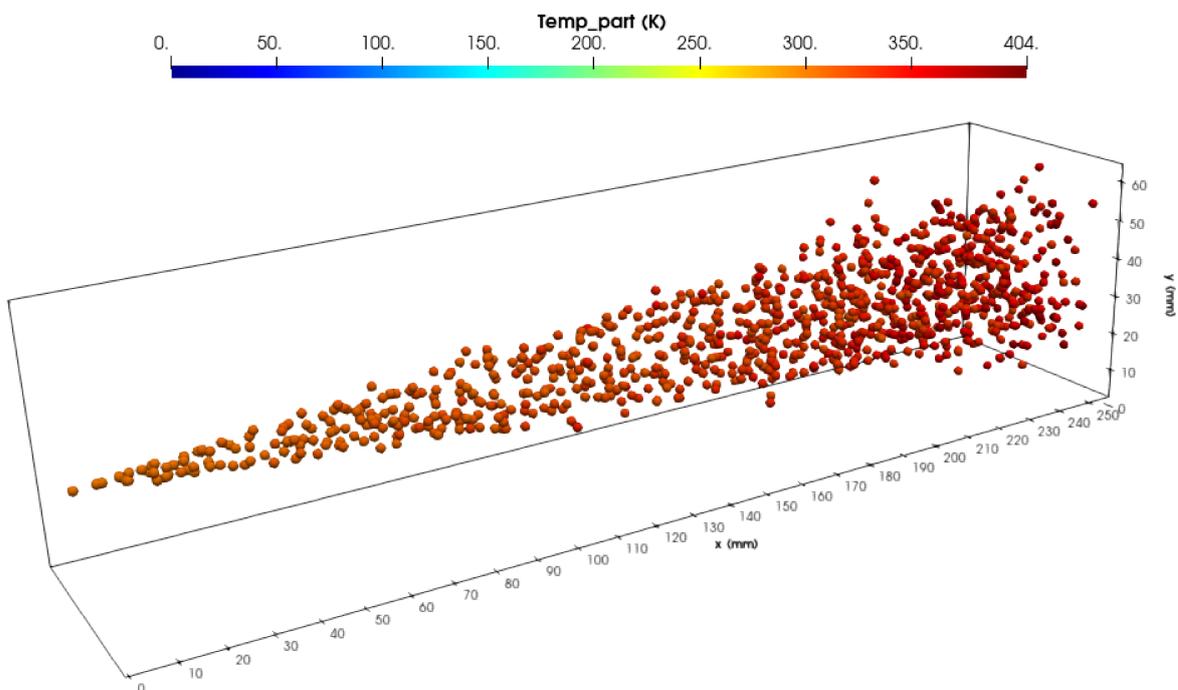


Figura 4.19: Distribuição de temperatura referente as partículas líquidas discretas no tempo 17,65 ms.

Na distribuição de velocidade das partículas pontuais representado em Fig. 4.20 é possível verificar que a velocidade das partículas lagrangianas de combustível tende a ser influenciada principalmente pela dinâmica do fluxo de gás circundante. À medida que o jato se desenvolve e se expande, a velocidade das partículas pode se ajustar para se aproximar da velocidade do escoamento de gás dominante.

Como a mistura gasosa está sem nenhuma velocidade, a tendência é que as partículas percam energia cinética ao longo do domínio conforme representado em Fig. 4.20

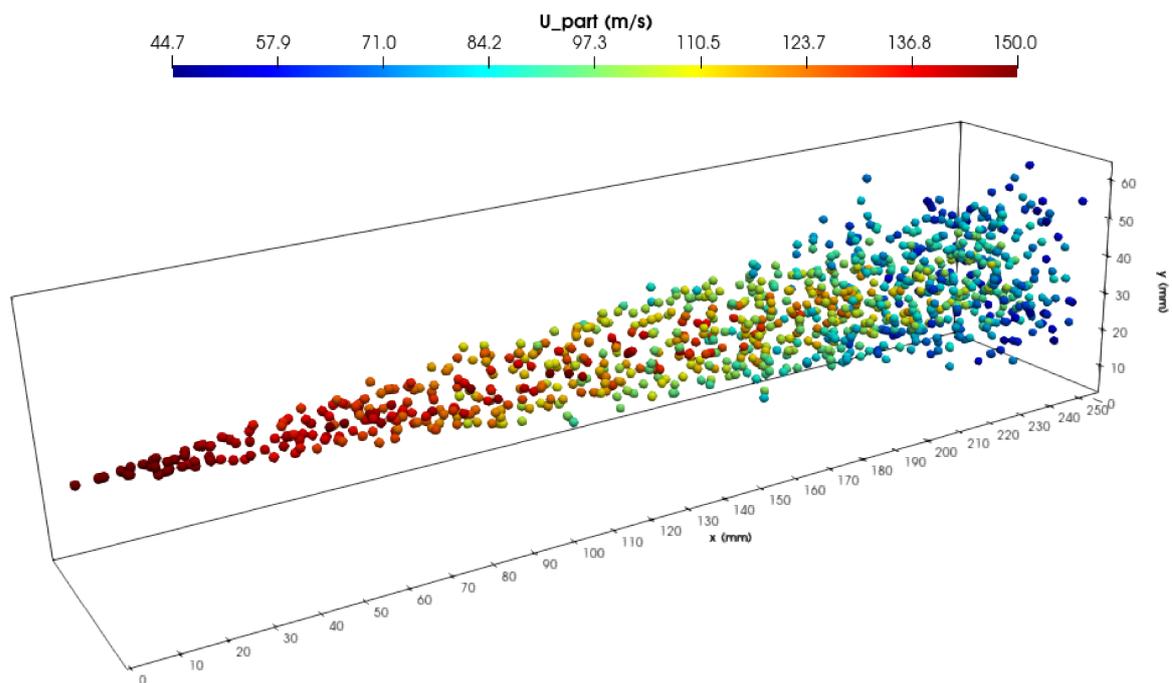


Figura 4.20: Distribuição de velocidade para as partículas líquidas discretas no tempo 17,65 ms.

O Senergy (termo fonte de energia) não está limitado exclusivamente à energia cinética envolvida no sistema. Em vez disso, é um conceito geral usado no contexto das equações de conservação para várias formas de energia, incluindo energia cinética, energia interna e energia potencial que estão presentes no sistema. Representa a taxa líquida pela qual a energia é adicionada ou removida de um sistema devido a diferentes processos ou influências externas.

Dentro deste contexto foi também analisado os termos fontes de energia e massa computados no sistema, no qual comparando ambas as distribuições referentes ao termo fonte de energia Fig. 4.21, com a de temperatura de cada partícula Fig. 4.19, se verifica a manutenção do comportamento típico já identificado por (PINHEIRO et al., 2022), no qual para as gotículas com temperatura mais baixa se percebe uma maior quantidade de energia associada Senergy (termo fonte de energia), uma vez que a diferença de temperatura ($T_g - T_d$) é maior. Além disso se verifica novamente que a quantidade de energia transferida do gás ambiente para a gota líquida depende não só da diferença de temperatura, mas também do tamanho da gota, uma vez que, as gotas maiores recebem mais energia, devido à sua maior área de superfície.

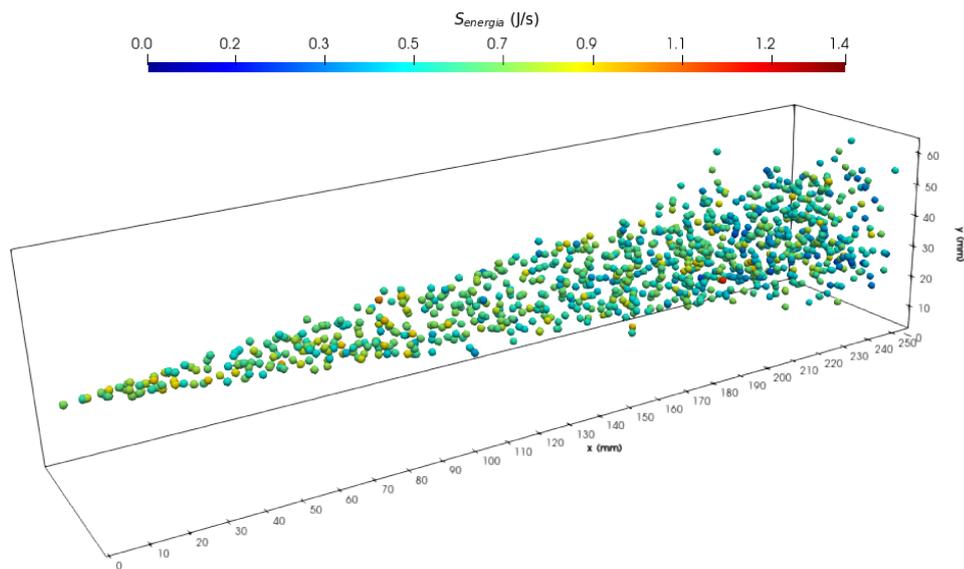


Figura 4.21: Distribuição de termo fonte de energia referente as partículas líquidas discretas no tempo 17,65 ms.

O Smass (termo fonte de massa) refere-se a uma quantidade presente nas equações de conservação de massa em dinâmica dos fluidos e outros problemas relacionados à transferência de massa. Ele representa uma taxa líquida de acúmulo ou remoção de massa em um sistema, podendo ser positivo quando a massa é adicionada e negativo quando a massa é removida. As distribuições referentes aos termos fontes de massa para cada espécie injetada e apresentada ao longo das Figs 4.22 a 4.27. Tais distribuições se definem como a transferência em massa vapor por parte das gotas em direção ao ambiente circundante, sendo por isso atribuído para este parâmetro módulo negativo.

O aumento de Smass (termo fonte de massa) se verifica para todos componentes devido ao fato de que quando as gotas começam a ser aquecidas, a maior parte da energia é recebida como calor sensível. Sendo logo depois recebida na forma de calor latente, representando desta maneira um aumento de Smass (termo fonte de massa). Além disso analisando para cada componente se é possível verificar também que este aumento de Smass relacionado ocorre logicamente de maneira mais antecipada para as espécies mais voláteis presentes como é o caso do Tolueno representado em Fig 4.22, e de maneira mais tardia para as espécies menos voláteis como é o caso n-Hexadecano dado em Fig 4.22.

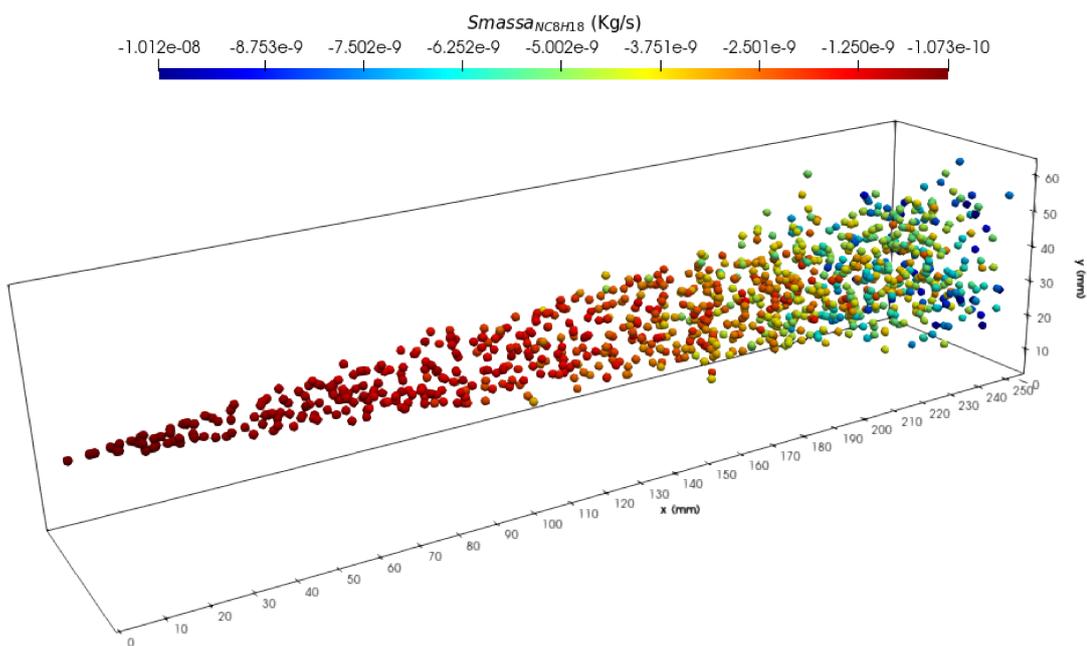


Figura 4.22: Distribuição de termo fonte de massa da gota referente a espécie de n-Octano.

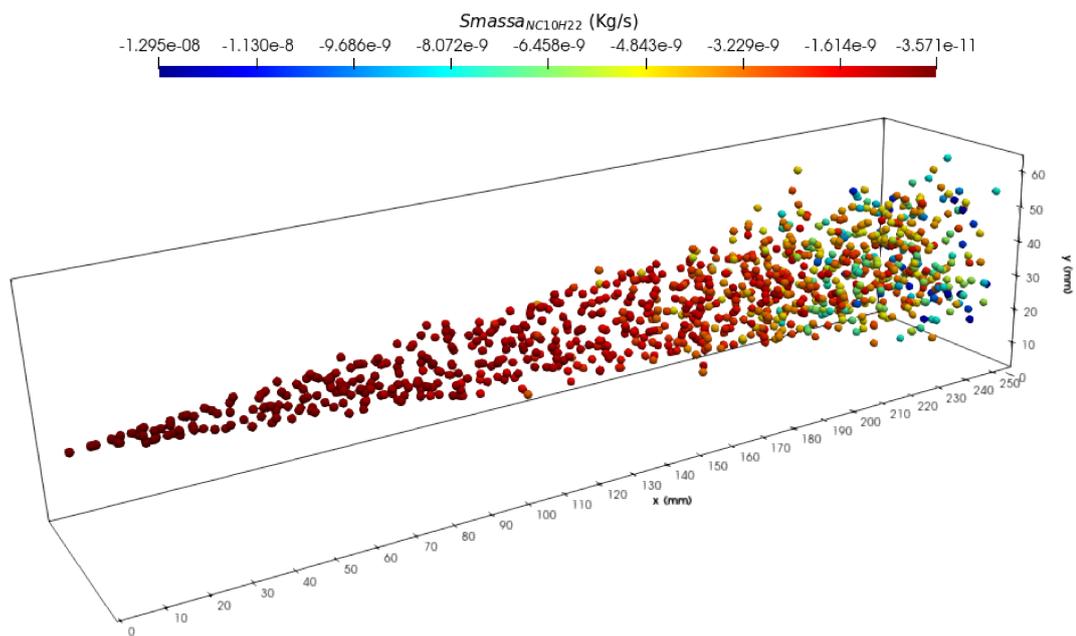


Figura 4.23: Distribuição de termo fonte de massa da gota referente a espécie de n-Decano.

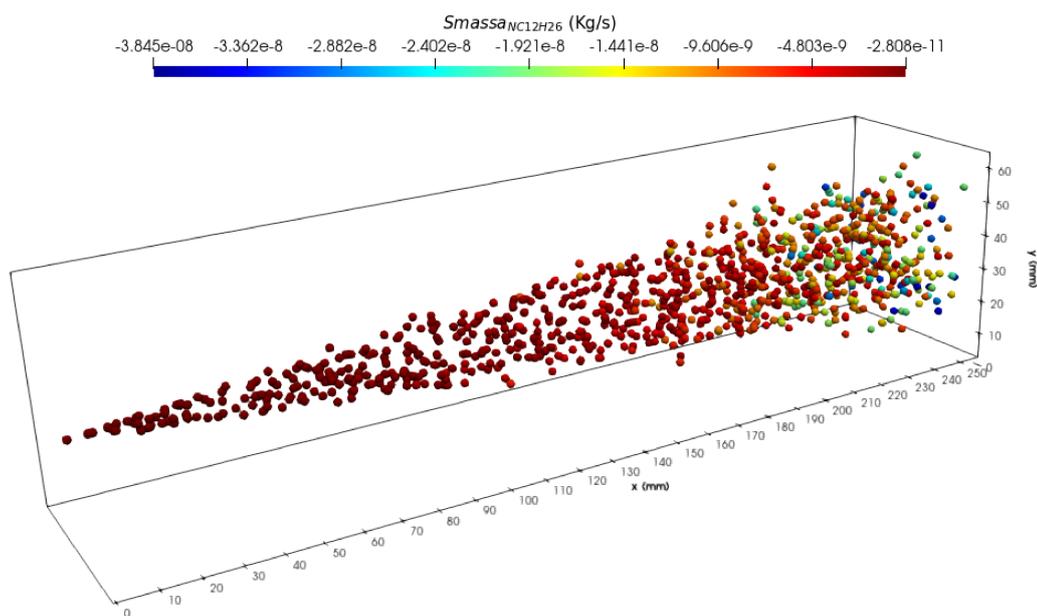


Figura 4.24: Distribuição de termo fonte de massa da gota referente a espécie de n-Dodecano.

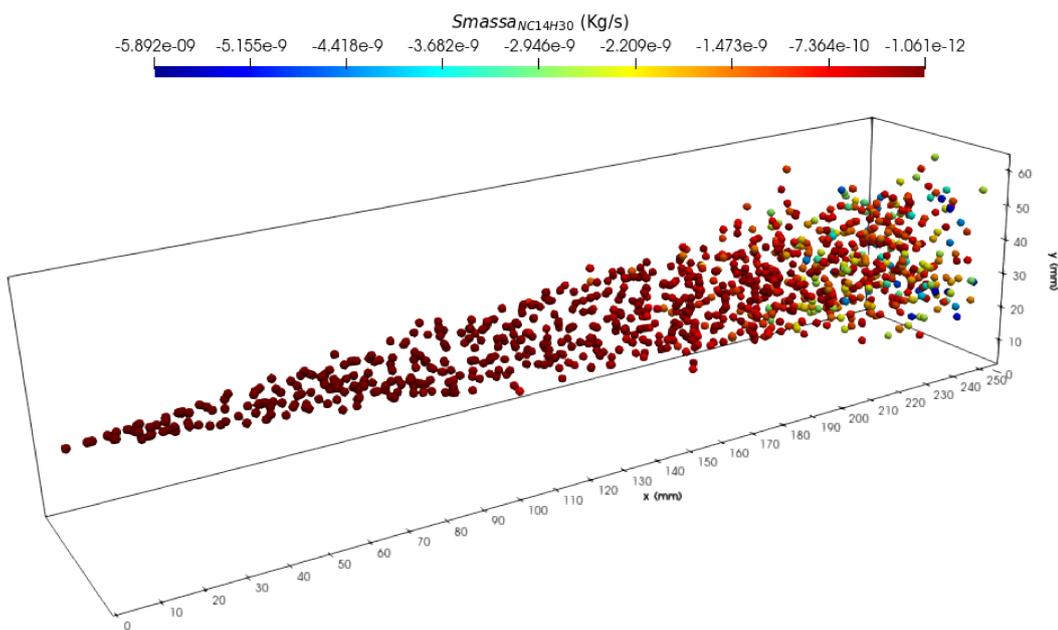


Figura 4.25: Distribuição de termo fonte de massa da gota referente a espécie de n-Tetradecano.

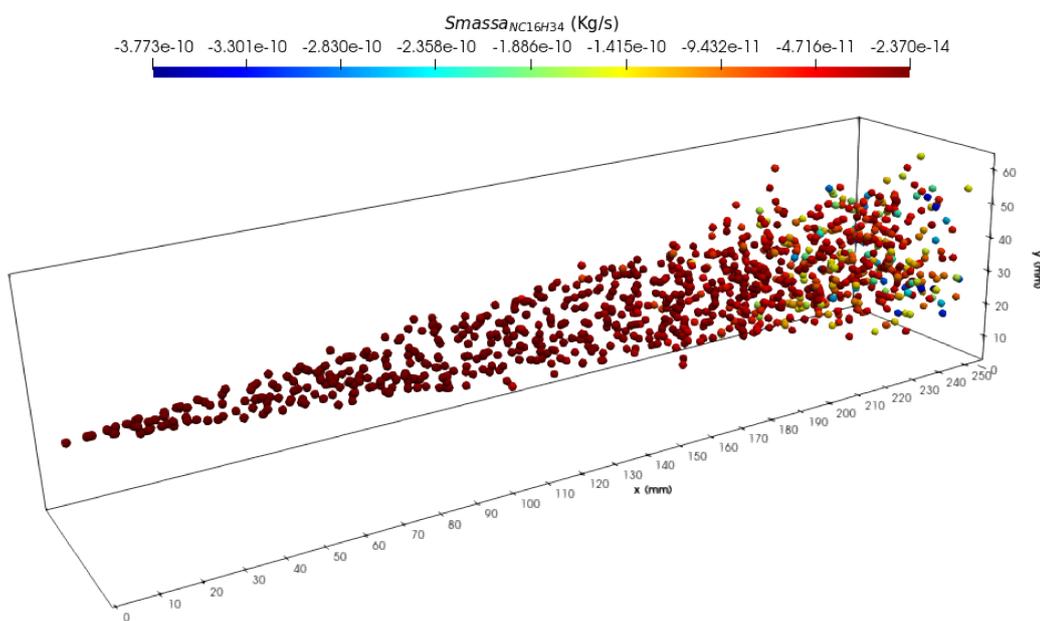


Figura 4.26: Distribuição de termo fonte de massa da gota referente a espécie de n-Hexadecano.

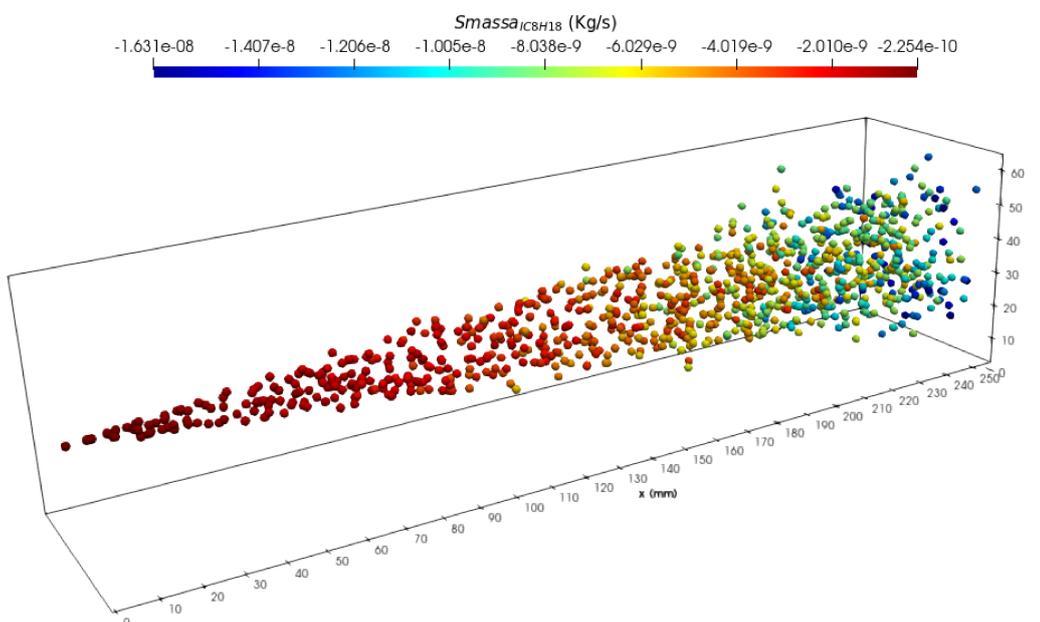


Figura 4.27: Distribuição de termo fonte de massa da gota referente a espécie de iso-Octano.

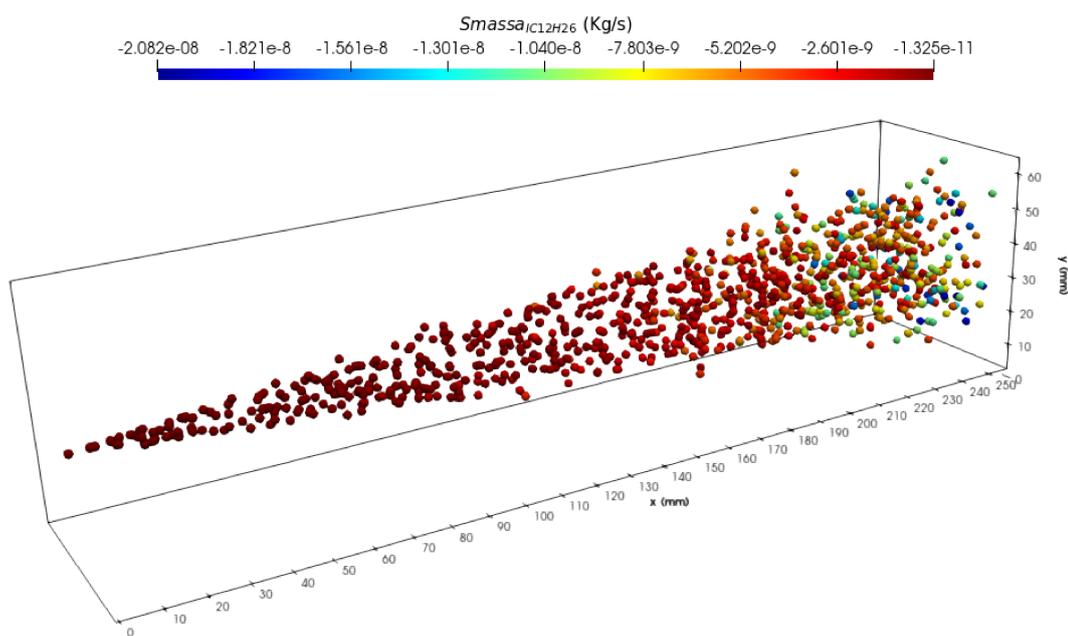


Figura 4.28: Distribuição de termo fonte de massa da gota referente a espécie de iso-Dodecano.

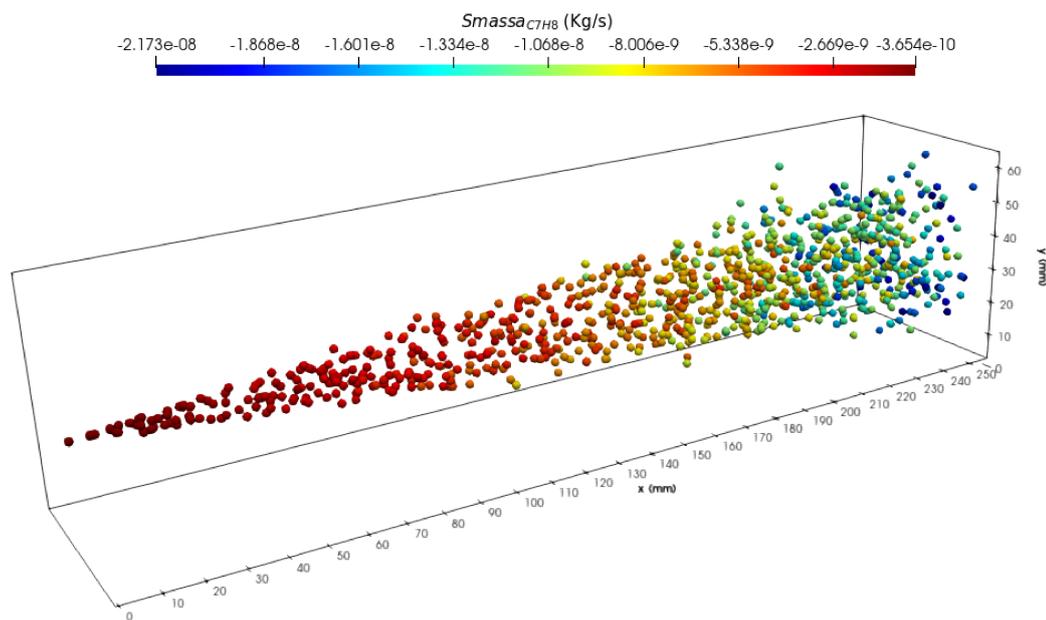


Figura 4.29: Distribuição de termo fonte de massa da gota referente a espécie de Tolueno.

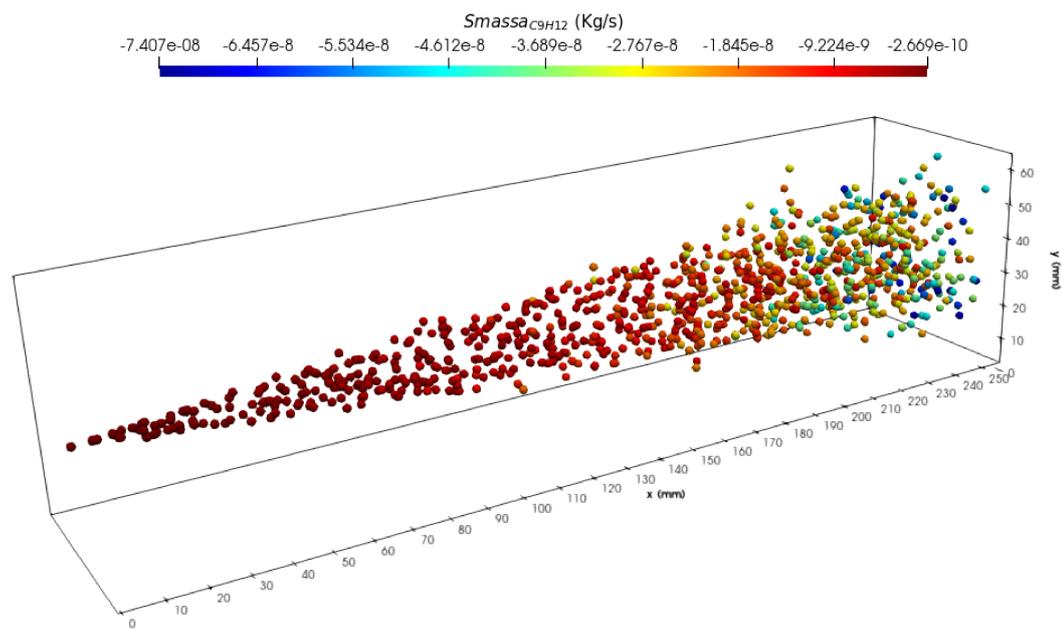


Figura 4.30: Distribuição de termo fonte de massa da gota referente a espécie de Mesitileno.

Durante a investigação do escoamento também se foram analisadas as frações instantâneas e médias formadas de cada espécie ao longo do domínio nas direções x e y . Tais relações demonstram o comportamento médio e instantâneo de cada componente em tais direções temporalmente. Com relação ao estudo estatístico apresentado as 120 primeiras amostras foram descartadas sendo somente inseridas para análise as 234 amostras seguintes de um total de 354 que foram geradas.

Para a direção y três linhas foram verificadas ao longo do domínio. Sendo em todos os casos a relação instantânea, média e o desvio padrão demonstrados.

A primeira linha no eixo y se refere a posição $x = 0,064$ m conforme demonstrado em Fig 4.31.

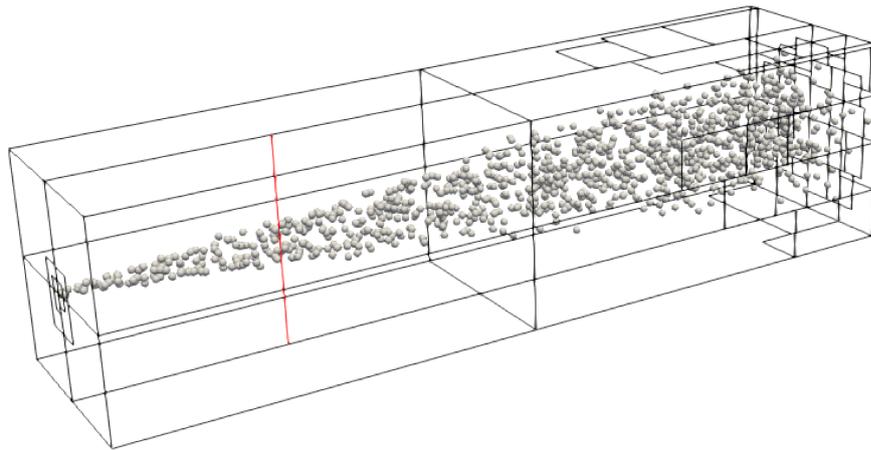


Figura 4.31: Vista do domínio retangular para a primeira posição verificada referente a $x = 0,064$ m.

Primeiramente as relações instantâneas, médias e de desvio padrão associado para cada espécie são representadas nas Figs. 4.32 a 4.36. A partir de tais resultados se pode verificar uma queda para todos os componentes de maneira mais íngreme na região central de y , no qual pode ser explicado por se tratar de um ponto do domínio no qual se concentra um maior numero de partículas ou seja uma região situada próxima a linha de injeção do jato.

Além disso também se pode verificar para cada espécie que no ponto mais íngreme de queda ocorre a formação de um pequeno pico. Para tal comportamento podemos inferir o fato de existir entre tais partículas a presença de espaços vazios, nos quais quando se demonstram de maneira concentrada ao longo da direção y provocam o aumento da contribuição mássica do gás. Neste caso em $y \approx 0,032$ m podemos inferir uma presença acentuada de espaços vazios.

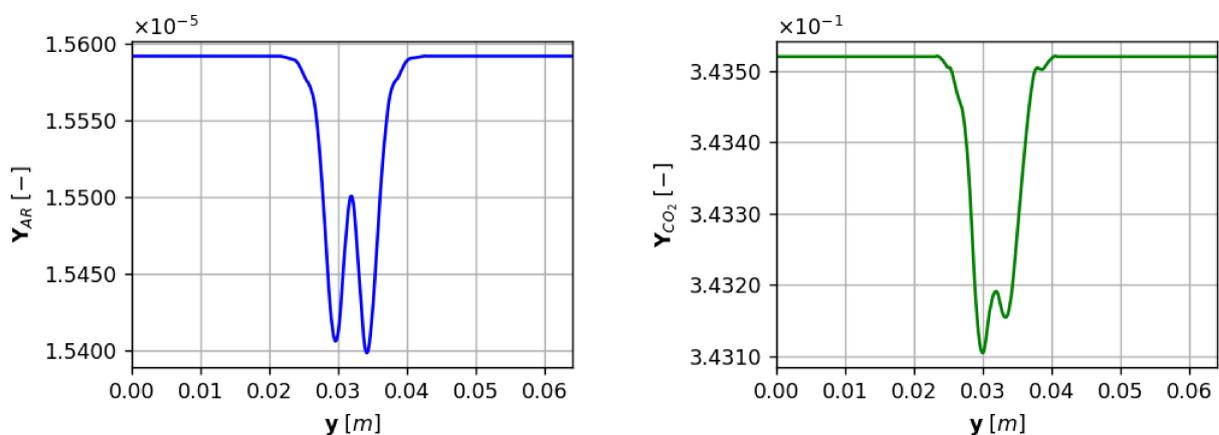


Figura 4.32: Distribuição das frações mássicas instantâneas de cada espécie gás em $x = 0,032$ m (■ Ar , ■ CO_2).

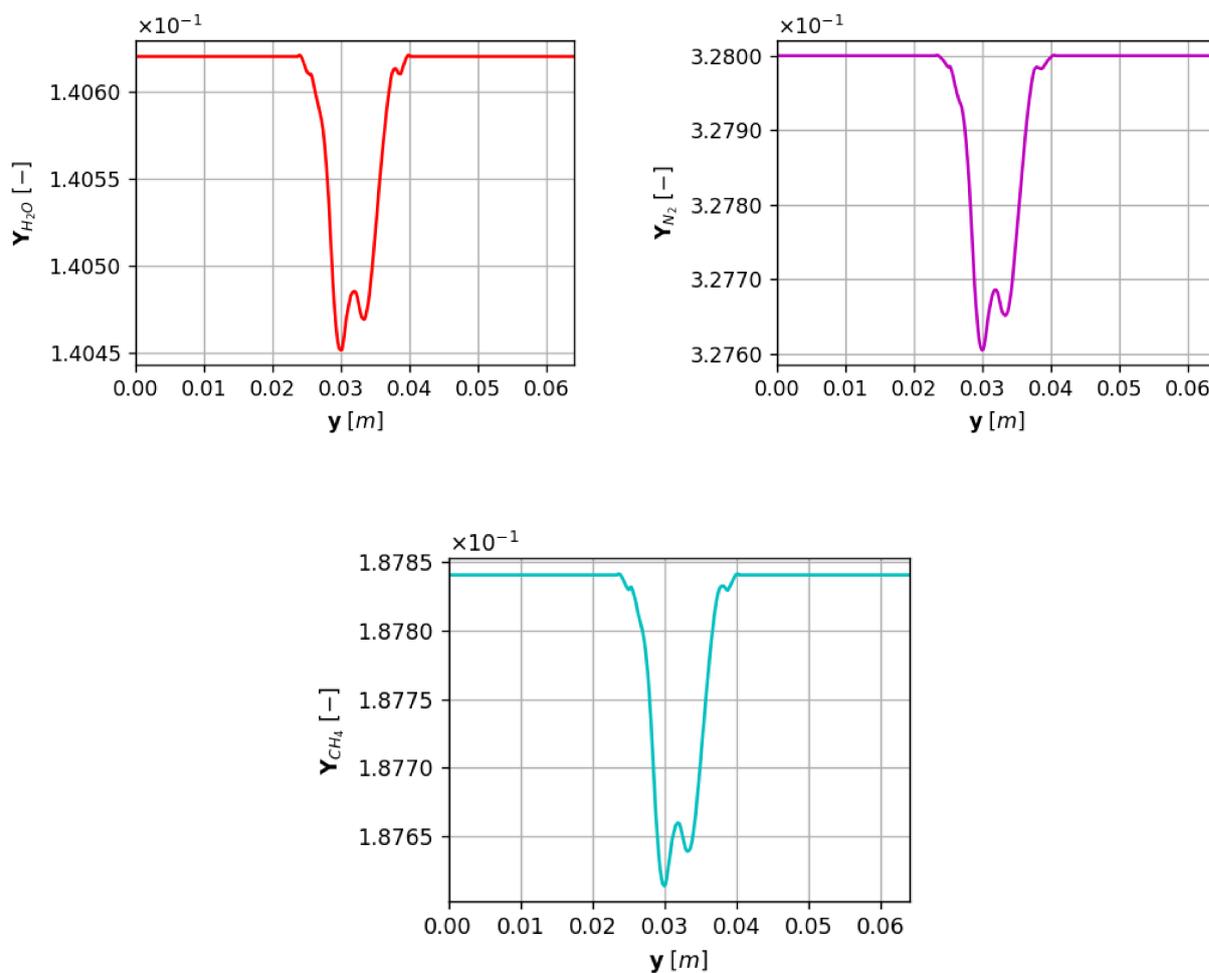


Figura 4.33: Distribuição das frações mássicas instantâneas de cada espécie gás em $x = 0,032$ m ([■] H_2O , [■] N_2) e [■] CH_4).

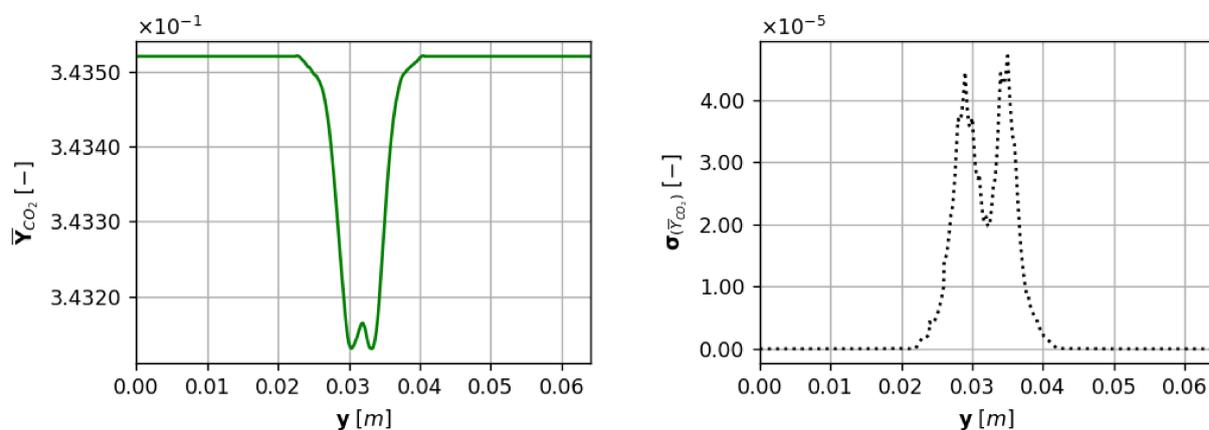


Figura 4.34: Distribuição das frações mássicas médias em conjunto com seu respectivo desvio padrão associado para cada espécie de gás em $x = 0,032$ m ([■] CO_2).

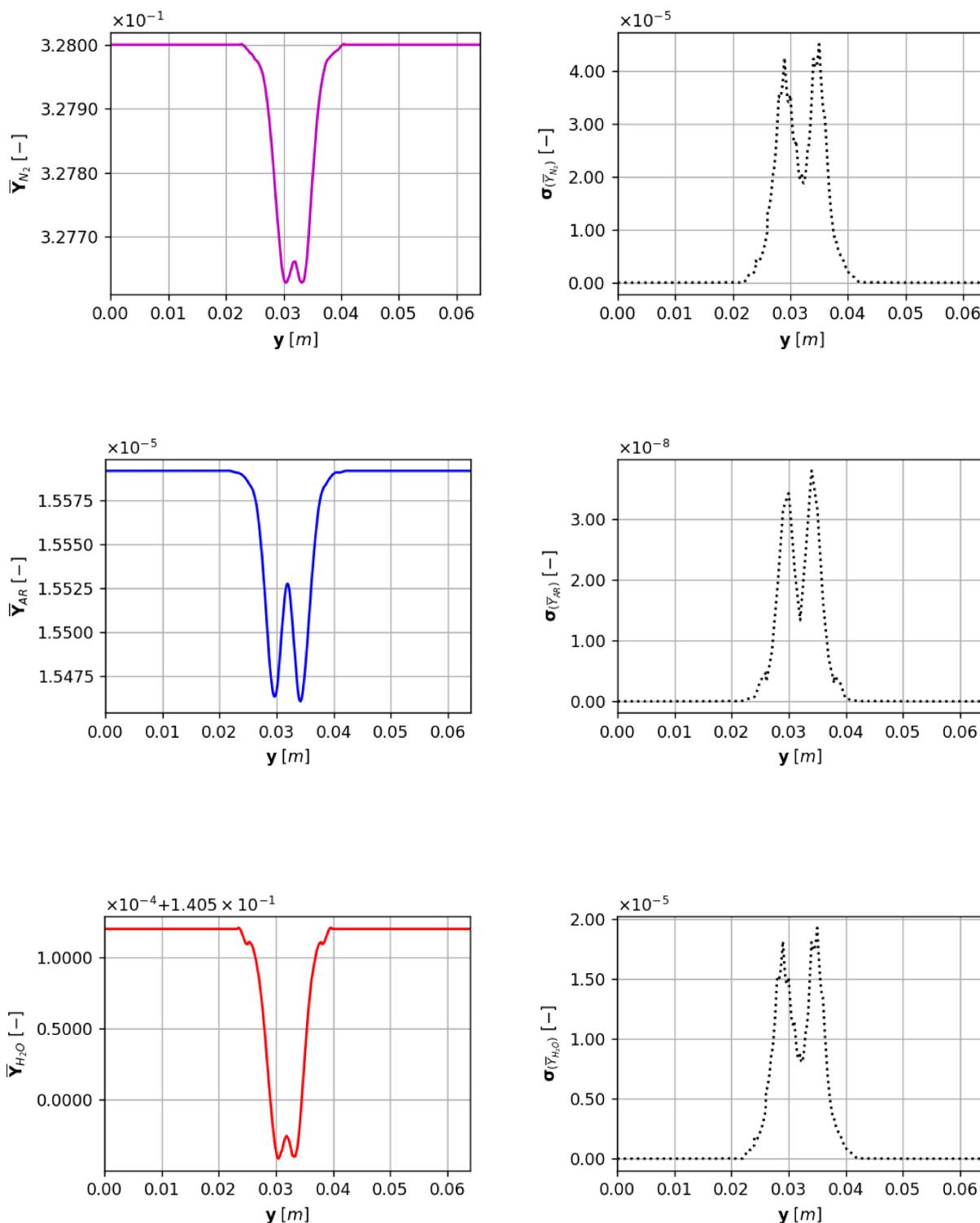


Figura 4.35: Distribuição das frações mássicas médias em conjunto com seu respectivo desvio padrão associado para cada especie de gás em $x = 0,032$ m (\blacksquare N_2 , \blacksquare Ar e \blacksquare H_2O).

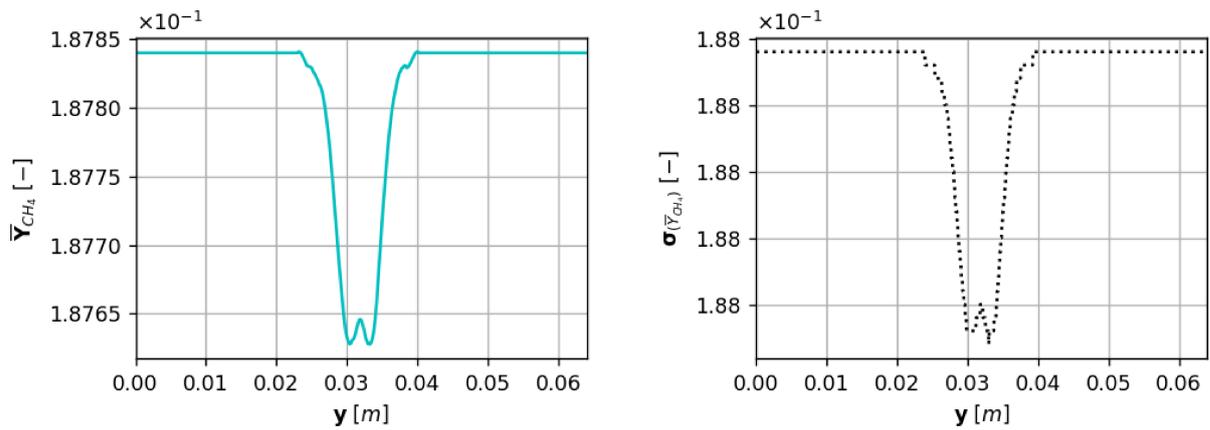


Figura 4.36: Distribuição das frações mássicas médias em conjunto com seu respectivo desvio padrão associado para cada espécie de gás em $x = 0,032$ m (\blacksquare CH_4).

A segunda linha no eixo y se refere a posição $x = 0,128$ m conforme demonstrado em Fig 4.37.

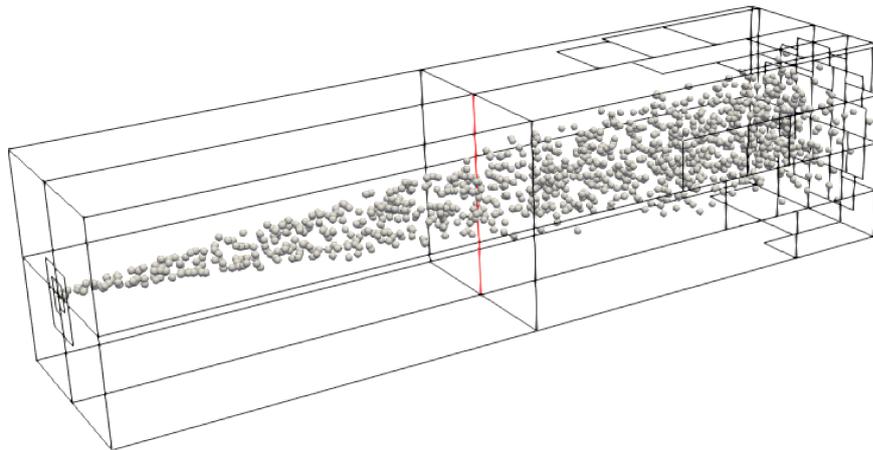


Figura 4.37: Vista do domínio retangular para a segunda posição verificada referente a $x = 0,128$ m.

As relações instantâneas, médias e de desvio padrão associado para cada espécie são representadas nas Figs 4.38 a 4.40. Para tal posição se pode verificar a manutenção com relação ao comportamento de queda na posição central de y , em conjunto agora com o alargamento dessa região, provocado pelo desenvolvimento do spray ao longo de x .

Isso pode ser explicado pelo fato de que conforme o processo de evaporação se intensifica, as partículas de combustível tendem a ficar mais dispersas, uma vez que, as moléculas de vapor começam a preencher o ambiente circundante. Tal dispersão infere ao problema o alongamento das regiões vazias presentes entre cada partícula, no qual se explica neste caso o aumento do pico formado ao redor da posição central de y para cada espécie de gás.

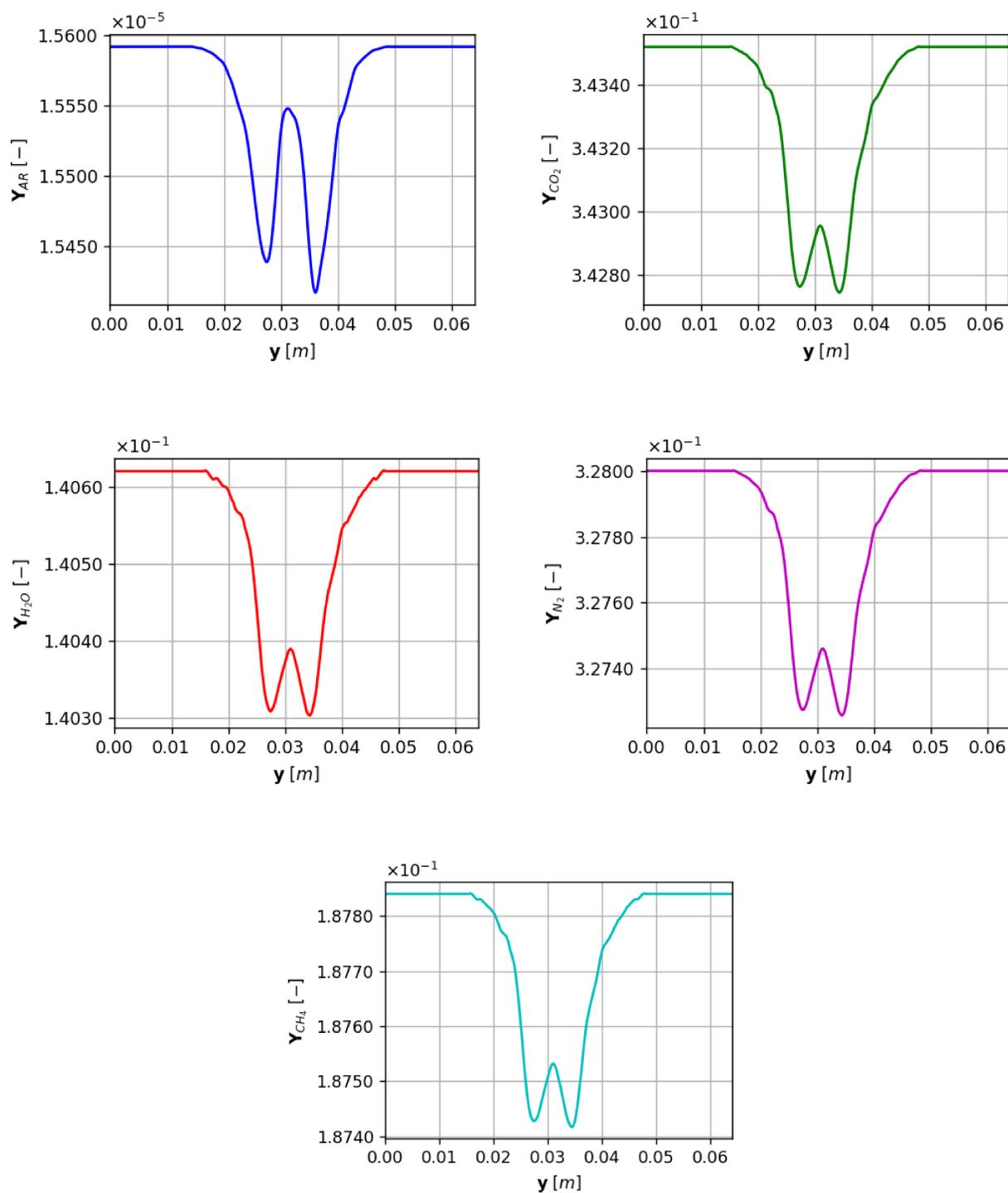


Figura 4.38: Distribuição das frações mássicas instantâneas de cada espécie gás em $x = 0,128$ m ([■] Ar e [■] CO_2) [■] H_2O , [■] N_2 e [■] CH_4).

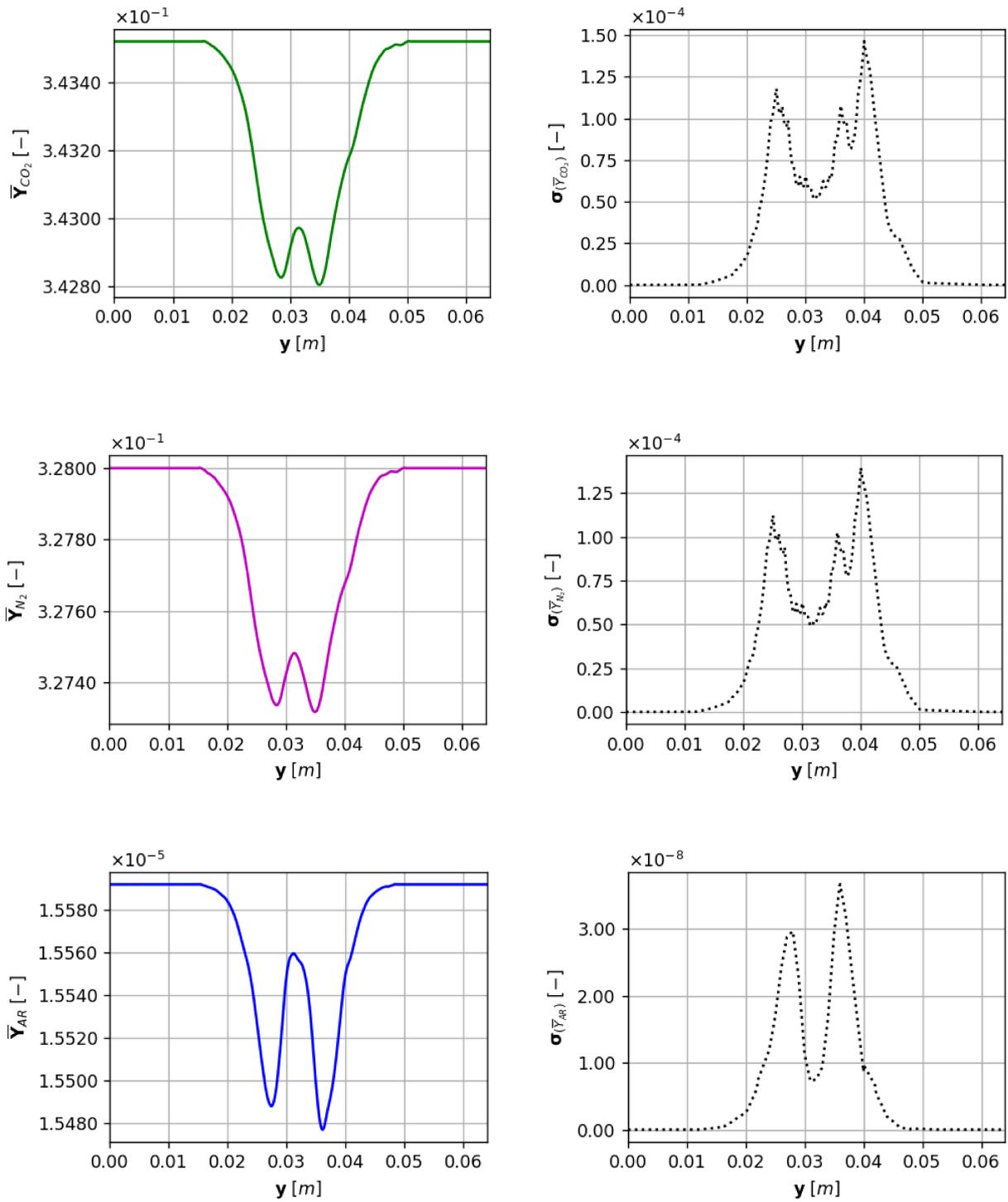


Figura 4.39: Distribuição das frações mássicas médias em conjunto com seu respectivo desvio padrão associado para cada especie de gás em $x = 0,128$ m (\blacksquare CO_2 , \blacksquare N_2 e \blacksquare Ar).

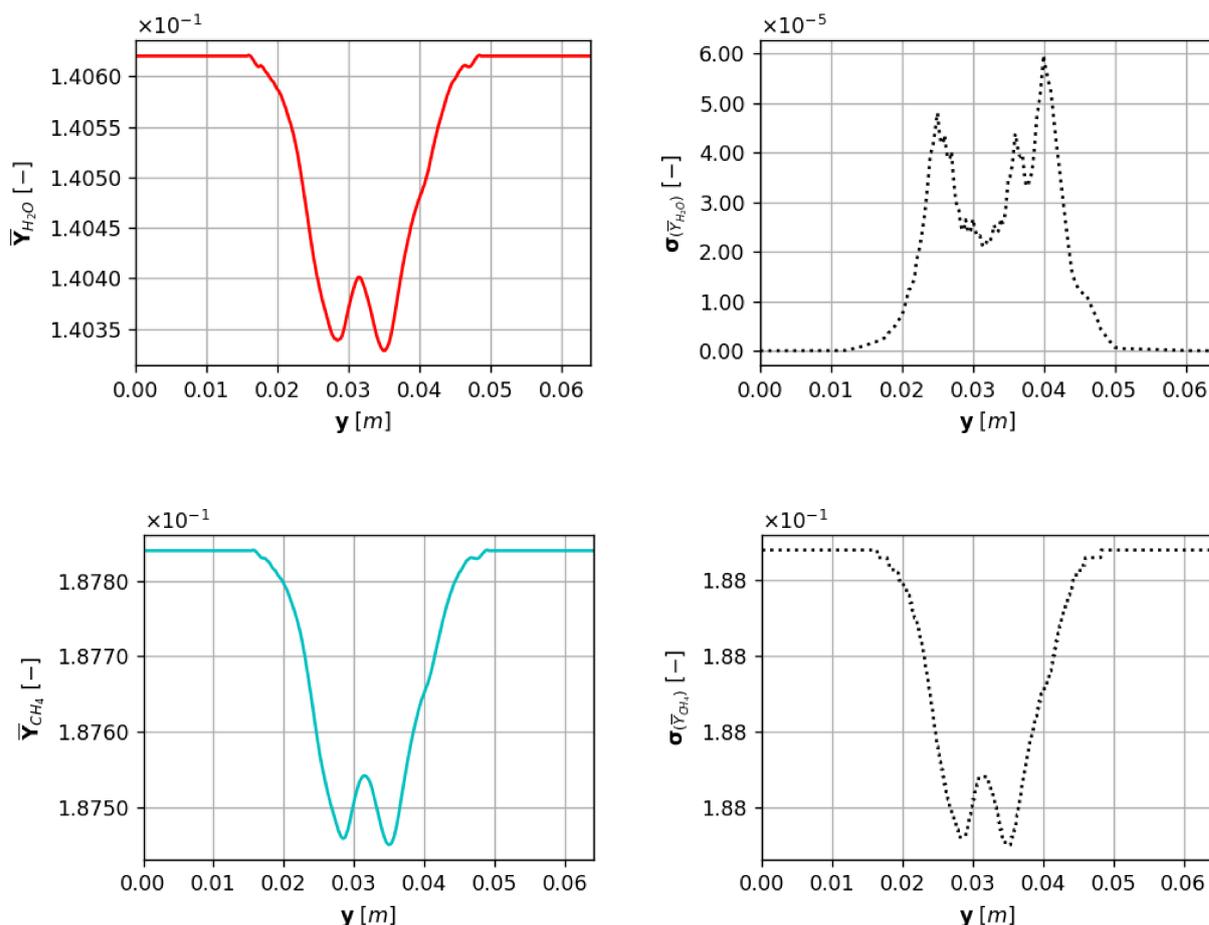


Figura 4.40: Distribuição das frações mássicas médias em conjunto com seu respectivo desvio padrão associado para cada espécie de gás em $x = 0,128$ m ([■] H_2O e [■] CH_4).

A terceira linha no eixo y se refere a posição $x = 0,192$ m conforme demonstrado em Fig. 4.41.

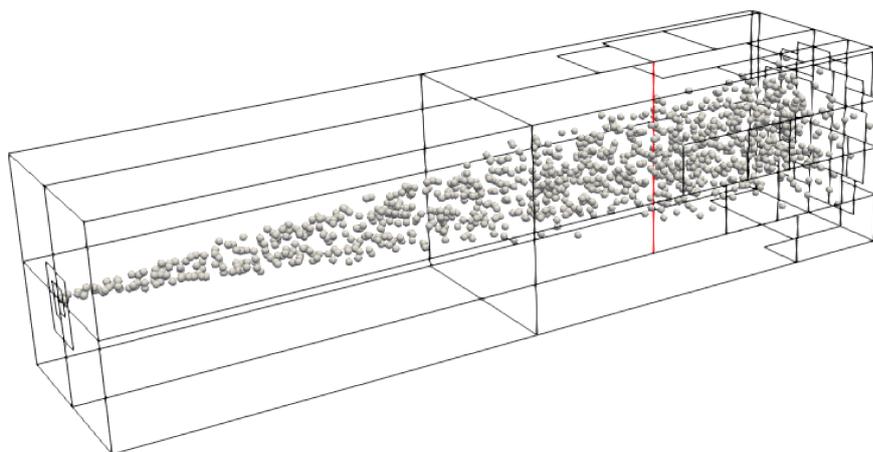


Figura 4.41: Vista do domínio retangular para a segunda posição verificada referente a $x = 0,128$ m.

As relações instantâneas, médias e de desvio padrão associado para cada espécie são representadas nas Figs. 4.42 a 4.44. Neste ponto o processo de evaporação de demonstra ainda

mais intensificado com uma dispersão ainda maior da partículas de combustível ao redor da linha central do jato. Tal ocorrência provoca com relação as frações mássicas um alargamento ainda maior ao redor da posição central de y .

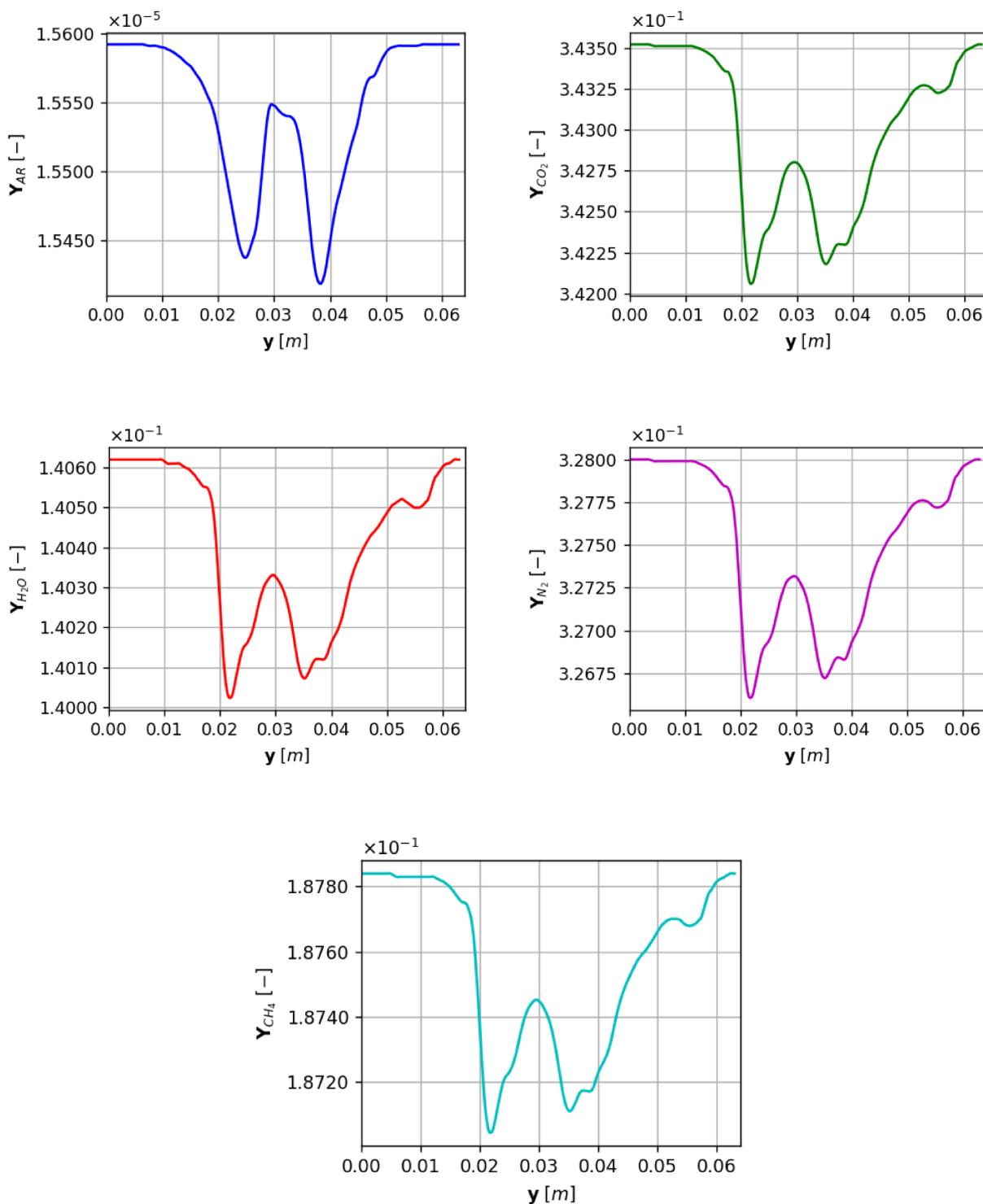


Figura 4.42: Distribuição das frações mássicas instantâneas de cada espécie gás em $x = 0,192$ m (\blacksquare Ar, \blacksquare CO_2 , \blacksquare H_2O , \blacksquare N_2 e \blacksquare CH_4).

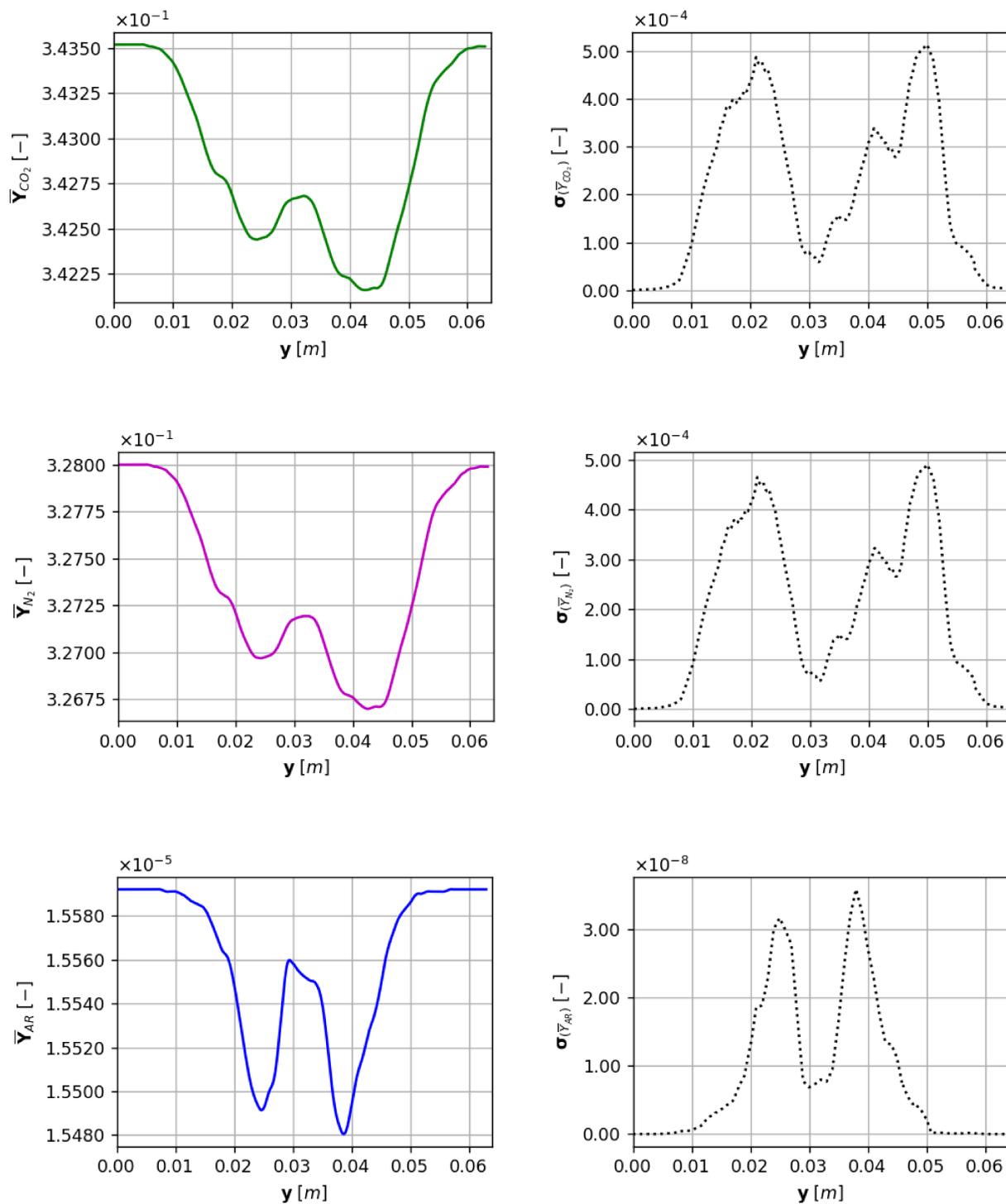


Figura 4.43: Distribuição das frações mássicas médias em conjunto com seu respectivo desvio padrão associado para cada espécie de gás em $x = 0,192$ m ([■] CO₂, [■] N₂, [■] Ar).

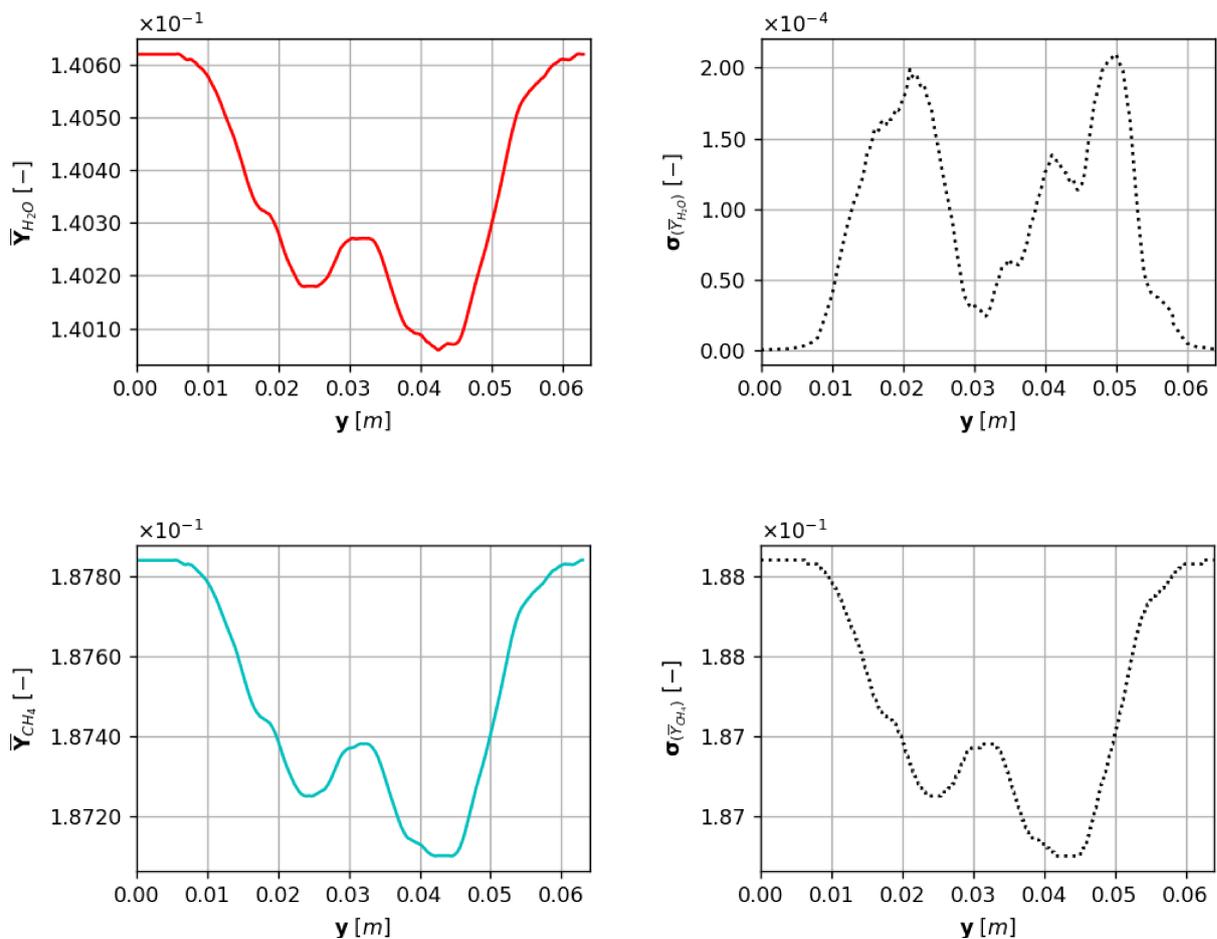


Figura 4.44: Distribuição das frações mássicas médias em conjunto com seu respectivo desvio padrão associado para cada espécie de gás em $x = 0,192$ m ([■] H_2O , [■] CH_4).

É interessante salientar que o preenchimento dessas frações de vapor no ambiente vai depender da volatilidade de cada espécie que representa o combustível. Sendo as mais voláteis suscetíveis a estarem presente no meio mais cedo na forma de vapor.

Em todas as três posições verificadas pode-se atrelar os comportamentos gráficos de decaimento e de pico das frações de gás na região central do domínio com a influência de vários fatores envolvidos, como a intensidade da turbulência, a escala das estruturas turbulentas, as taxas de injeção das partículas como também a forma como a turbulência interage com as partículas. No contexto do modelo dinâmico de turbulência aplicado, o decaimento das frações de gás ao longo da linha central de injeção pode ser explicado devido a capacidade da turbulência em misturar e transportar as espécies gasosas para fora da região central de injeção do spray resultando desta forma em uma diminuição das frações de gás ao longo desta região do domínio. Por outro lado devido à natureza dinâmica do modelo de turbulência, podem surgir regiões com níveis locais de alta turbulência. Essas áreas, por sua vez podem, agir

como armadilhas para as partículas gasosas circundantes, levando neste sentido à formação de um pico na concentração de tais espécies na região central de injeção do spray.

Outra análise também verificada neste trabalho se refere ao comportamento instantâneo e médio de cada espécie com relação ao eixo central do jato conforme representado em Fig. 4.45.

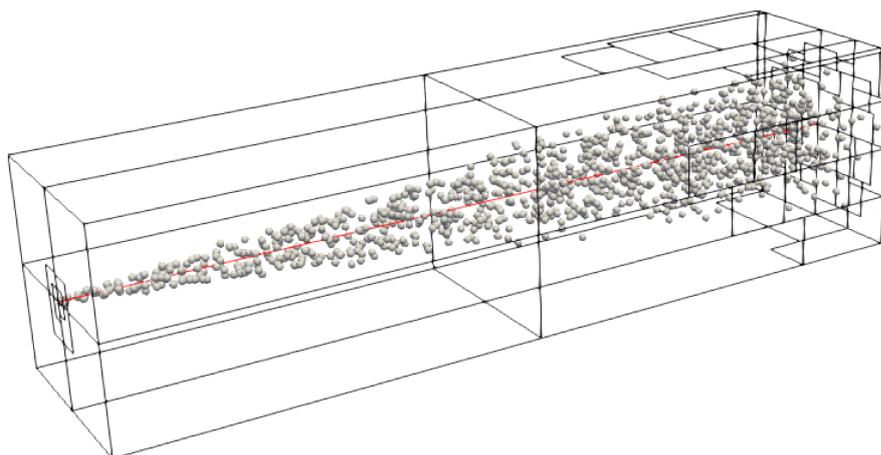


Figura 4.45: Vista do domínio retangular para a posição central verificada referente.

As relações instantâneas, médias e de desvio padrão associado para cada espécie são representadas nas Figs. 4.46 a 4.48.

A partir de tais resultados é possível de se verificar o decaimento das frações de cada espécie de gás ao longo de x . A medida que as partículas de combustível evaporam e a configuração de dispersão entre elas ocorre, a região que corresponde a linha central do jato fica cada vez mais contendo um número maior de partículas o que explica o decaimento da solução gasosa para cada espécie ao longo de x .

É interessante de se verificar também o comportamento apresentado pela fração de argônio ao longo do eixo central do jato. Este comportamento de queda inicial na sua fração seguida de um aumento e manutenção constante pode estar relacionada ao fato de que o argônio, estando em uma proporção muito baixa, absorve os erros da simulação, como instabilidades e estados transientes durante os primeiros passos de tempo, ou seja, quando a simulação começa, pode haver certa instabilidade ou estado transiente no escoamento e na distribuição das espécies de gás. Nesse estágio inicial, os erros podem se manifestar como variações nas frações mássicas de argônio, resultando em uma queda temporária em sua concentração ao longo do domínio.

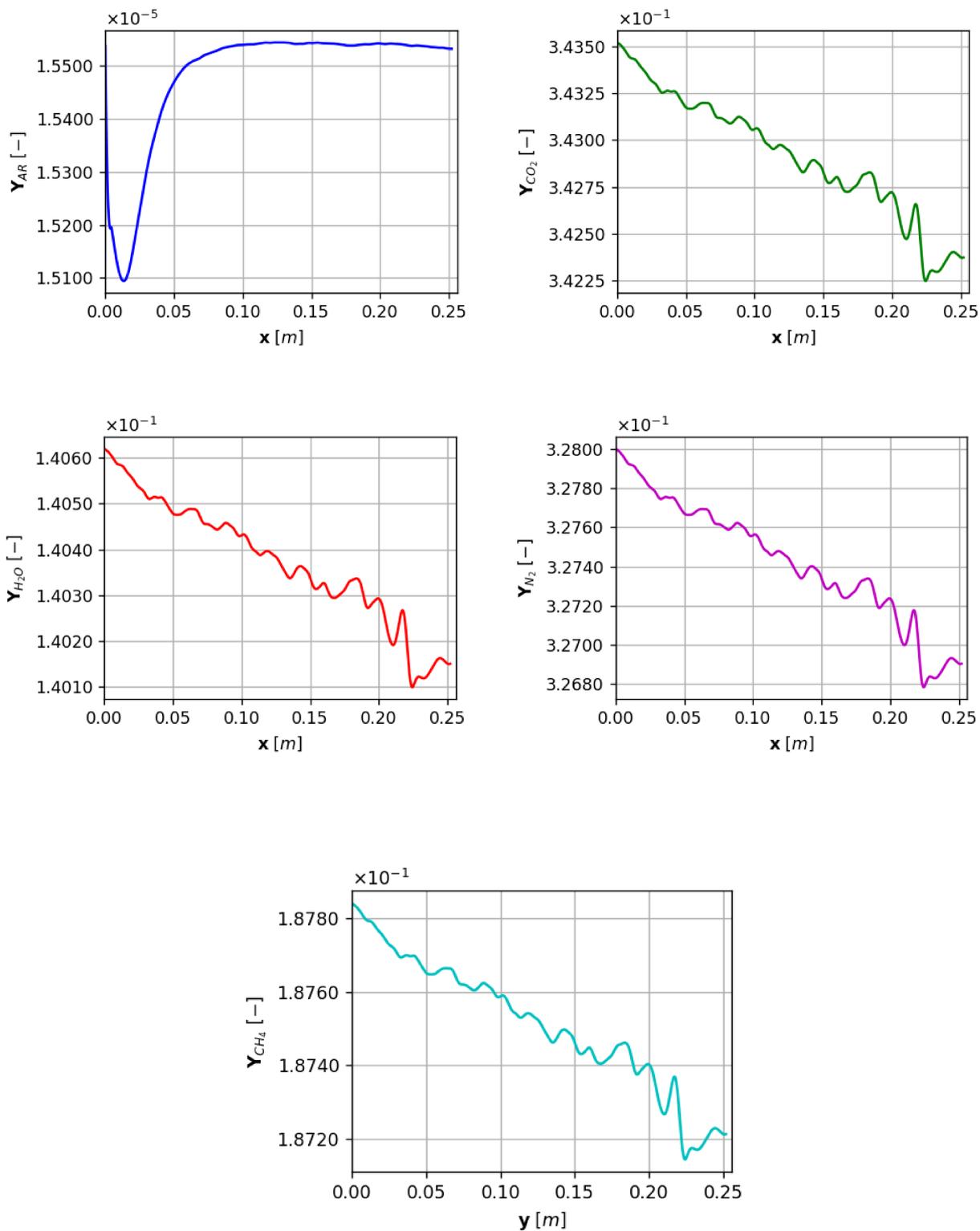


Figura 4.46: Distribuição das frações mássicas instantâneas de cada especie gás no eixo central do jato ($[■]$ Ar, $[■]$ CO_2 , $[■]$ H_2O , $[■]$ N_2 e $[■]$ CH_4).

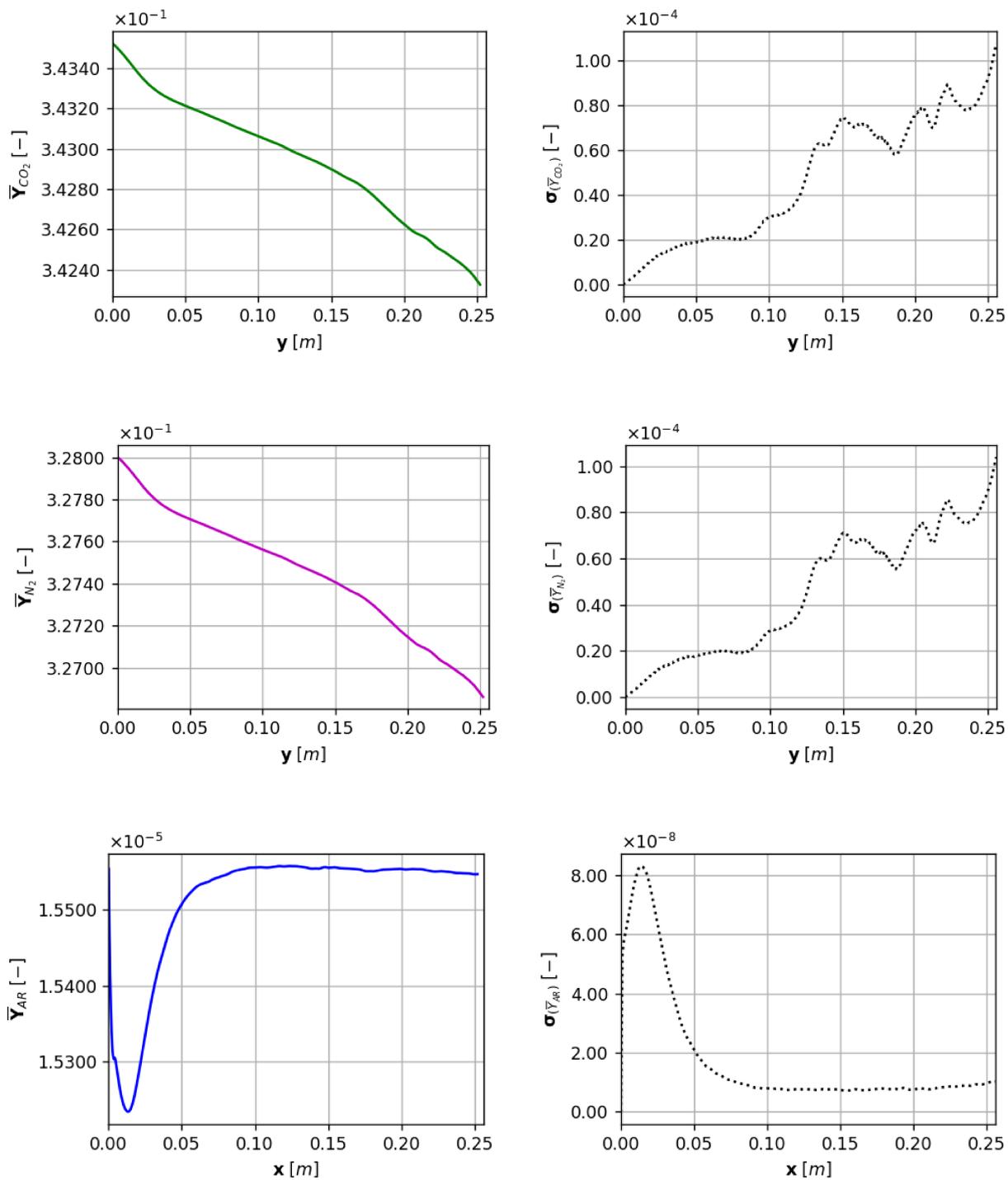


Figura 4.47: Distribuição das frações mássicas médias em conjunto com seu respectivo desvio padrão associado para cada espécie de gás no eixo central do jato. ([■] CO_2 , [■] N_2 e [■] Ar).

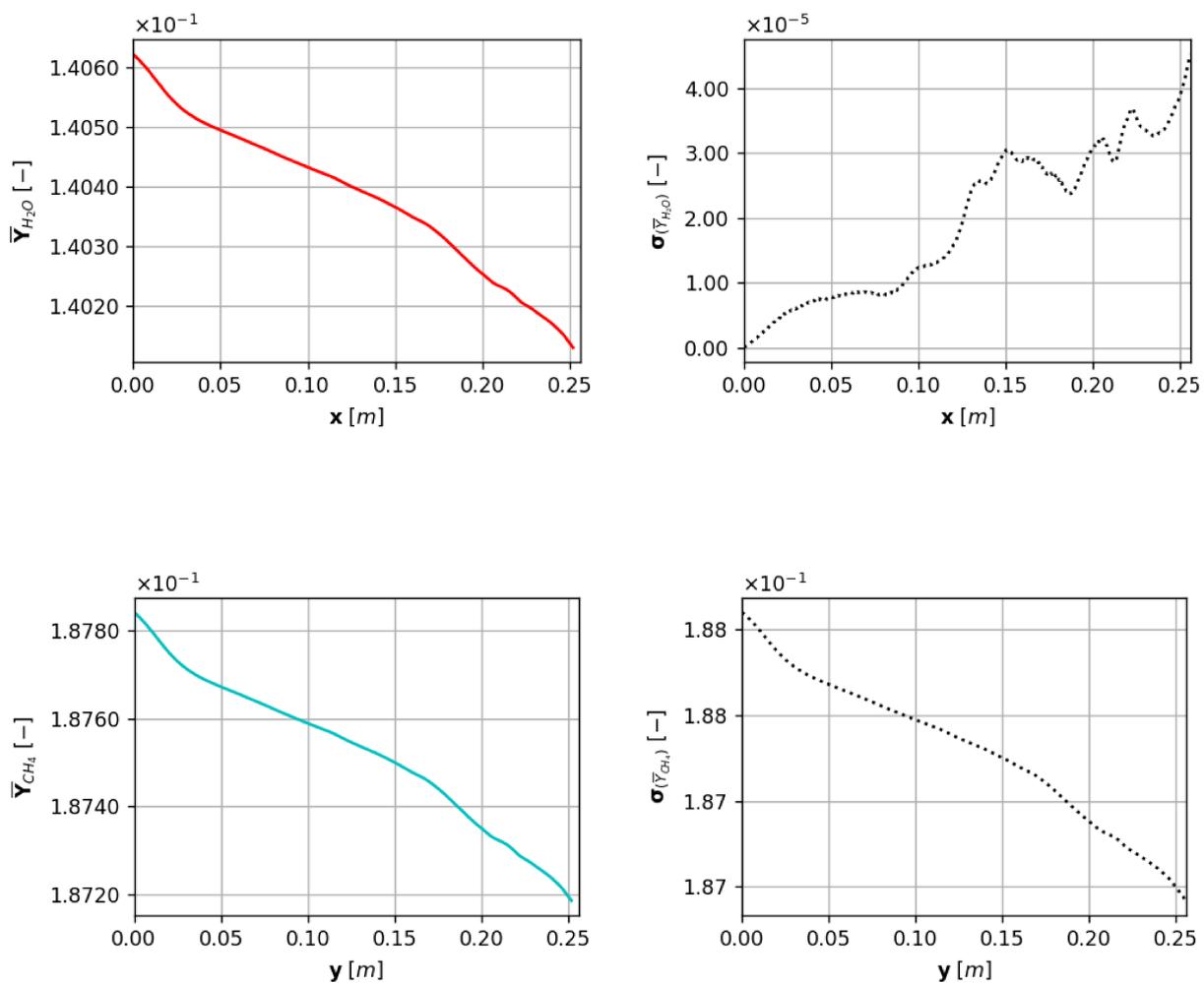


Figura 4.48: Distribuição das frações mássicas médias em conjunto com seu respectivo desvio padrão associado para cada espécie de gás no eixo central do jato ([■] H_2O e [■] CH_4).

CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

As verificações feitas neste trabalho envolvendo a evaporação de gotículas de combustível em um ambiente inerte do tipo heterogêneo se demonstraram apresentar um comportamento físico esperado. Para a primeira análise que se tratava em comparar a evaporação de uma gota única em diferentes tipos de ambientes reduzidos para a solução gasosa ar, diversos parâmetros foram analisados e o que se demonstrou foi que, ao tentar evaporar uma única gota em ar e nitrogênio, pode-se esperar que a evaporação fosse mais rápida no ambiente de ar devido à presença de outras espécies e possíveis reações químicas. Por outro lado, a evaporação em um ambiente contendo apenas nitrogênio pode ser mais lenta devido à falta de interações moleculares adicionais. Neste sentido, para o caso envolvendo a evaporação de tal gota em um ambiente ar enriquecido, o aumento da pressão parcial de vapor associado provoca ao sistema o aumento na taxa de evaporação da gota descadeando por consequência um processo de evaporação mais rápido.

Para o segundo caso que envolvia de fato o caso de injeção, que se tratava basicamente da análise das frações mássicas médias correspondentes de cada espécie de gás, foi possível notar o decaimento de tais componentes ao longo do eixo central do spray, como também a preservação do comportamento evaporativo com relação alguns parâmetros tais como a evaporação de cada espécie de combustível segundo sua volatilidade, decaimento da temperatura do gás quando em proximidade com a região de injeção, diminuição da temperatura de cada gotícula de querosene ao longo do domínio dentre outros.

Deixando bem claro alguns pontos que foram reavaliados e concluídos durante a execução deste trabalho:

→ **Simplificação do ambiente ar em simulações envolvendo processos como evaporação e combustão**

- Evaporação em ambiente de ar: o ambiente de ar, que contém diferentes espécies, como oxigênio, nitrogênio, dióxido de carbono, entre outros, pode influenciar o processo de evaporação da gota. A presença dessas espécies adicionais pode acelerar a evaporação por meio de reações químicas e interações moleculares, resultando em uma taxa de evaporação potencialmente mais rápida.
- Evaporação em ambiente de nitrogênio: em um ambiente contendo apenas nitrogênio, a evaporação ocorrerá principalmente devido à difusão de moléculas de nitrogênio na interface entre a gota e o ambiente. A taxa de evaporação dependerá das propriedades físicas da gota e da difusividade do nitrogênio. No entanto, a falta de outras espécies no ambiente pode resultar em uma taxa de evaporação relativamente mais lenta em comparação com o ambiente de ar.

→ **Contribuição das fracções mássicas de gás ao longo de um domínio contendo somente evaporação**

Para um ambiente contendo somente o processo de evaporação as fracções mássicas de cada espécie de gás apresentam quase ou nenhuma variação ao longo do domínio a menos que entre em contato ou se aproxime da região do jato que esteja evaporando. Em tal região a concentração do gás em primeiro momento cairá drasticamente seguida da sua uniformização à medida que as moléculas de vapor que faziam parte do jato preencham o ambiente inerte.

→ **Computação do coeficiente de difusividade da mistura para um ambiente contendo varias especies de gás**

Nesta etapa foi preciso uma verificação na literatura a respeito da computação do coeficiente de difusividade de maneira correta. Em um primeiro momento foi encontrada grande dificuldade de computação, devido à necessidade de computação direta pelo software aberto Cantera.

Para obtenção dos resultados, leis de mistura presentes na literatura foram implementadas manualmente. Entretanto espera-se que para o futuro a computação possa ser feita

diretamente pelo Cantera. Para isso acredita-se que se deva fazer uma revisão maior do software com relação aos modelos termodinâmicos fornecidos por tal como também de toda a implementação personalizada inserida dentro do código MFSim.

→ **Necessidade de validação experimental**

Apesar deste caso de injeção apresentar valores condizentes com a física do processo de evaporação, ainda se faz necessária a validação do caso experimentalmente. Isso porque através da validação se poderá garantir a confiabilidade, a precisão do modelo de simulação, identificar limitações, aprimorar o modelo e fornecer uma base sólida para aplicações práticas e estudos futuros. Logo tal etapa torna-se necessária.

→ **Limitações para estados supercríticos**

Para grande parte das aplicações industriais, o estado termodinâmico associado a determinado conjunto ou sistema relacionado geralmente se encontra no estado supercrítico. Logo torna-se de fundamental importância a simulação de casos como estes para condições supercríticas

→ **Necessidade de alongamento do domínio de injeção**

Durante a análise das frações gasosas e líquidas envolvidas no caso de injeção, é possível notar que o processo evaporativo se demonstra mais intensificado já no final da região direita do domínio, logo se faz necessário para uma análise mais completa de tal fenômeno a necessidade de alongamento do domínio de injeção.

→ **Verificação da distribuição de temperatura das partículas líquidas de combustível envolvendo uma escala menor**

Durante a análise da distribuição de temperatura para as partículas líquidas de combustível ao longo do domínio, é possível verificar a necessidade de análise destas gotas em um range de temperatura menor (250 - 410)K, tal análise facilitaria a verificação do processo de aquecimento com mais detalhamento associado.

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.

ABRAMZON, B.; SIRIGNANO, W. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 32, n. 9, p. 1605–1618, 1989. ISSN 0017-9310. DOI: [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(89\)90043-4](https://doi.org/10.1016/0017-9310(89)90043-4). Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931089900434>.

BIRD, R. B. Transport phenomena. **Applied Mechanics Reviews**, v. 55, n. 1, r1–r4, jan. 2002. ISSN 0003-6900. DOI: [10.1115/1.1424298](https://doi.org/10.1115/1.1424298). eprint: https://asmedigitalcollection.asme.org/appliedmechanicsreviews/article-pdf/55/1/R1/5438575/r1_1.pdf. Disponível em: <https://doi.org/10.1115/1.1424298>.

BOUSSINESQ, J. **Essai sur la théorie des eaux courantes**. [S.l.]: Impr. nationale, 1877.

CARSLAW, H.; JAEGER, J. **Conduction of heat in solids. Aufl.** [S.l.]: Oxford: Clarendon Press, Oxford University Press, 1986.

CHOUDHURY, M. **Evaporation of a Droplet: From physics to applications**. Elsevier, 2019.

CLIFT, R.; GRACE, J. R.; WEBER, M. E. **Bubbles, drops, and particles**. Courier Corporation, 2005.

CONTINILLO, G.; SIRIGNANO, W. Numerical study of multicomponent fuel spray flame propagation in a spherical closed volume. In: ELSEVIER, 1. SYMPOSIUM (International) on Combustion. [S.l.: s.n.], 1989. v. 22, p. 1941–1949.

COONEY, A. Y.; SINGER, S. L. A hybrid droplet vaporization-chemical surrogate approach for emulating vaporization, physical properties, and chemical combustion behavior of multicomponent fuels. **Proceedings of the Combustion Institute**, Elsevier, v. 37, n. 3, p. 3229–3236, 2019.

CROWE, C. T.; STOCK, D. E.; SHARMA, M. P. The particle-source-in cell /PSI-CELL/ model for gas-droplet flows. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 99, p. 325–332, jun. 1977.

DAMASCENO, M. M. R. et al. Desenvolvimento de uma modelagem para escoamentos reativos em malhas adaptativas do tipo bloco-estruturada. Universidade Federal de Uberlândia, 2018.

DOOLEY, S.; WON, S. H.; CHAOS, M. et al. A jet fuel surrogate formulated by real fuel properties. **Combustion and flame**, Elsevier, v. 157, n. 12, p. 2333–2339, 2010.

DOOLEY, S.; WON, S. H.; HEYNE, J. et al. The experimental evaluation of a methodology for surrogate fuel formulation to emulate gas phase combustion kinetic phenomena. **Combustion and Flame**, Elsevier, v. 159, n. 4, p. 1444–1466, 2012.

ELWARDANY, A.; SAZHIN, S. A quasi-discrete model for droplet heating and evaporation: application to Diesel and gasoline fuels. **Fuel**, Elsevier, v. 97, p. 685–694, 2012.

FAETH, G. Evaporation and combustion of sprays. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 9, n. 1, p. 1–76, 1983. ISSN 0360-1285. DOI: [https://doi.org/10.1016/0360-1285\(83\)90005-9](https://doi.org/10.1016/0360-1285(83)90005-9), Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0360128583900059>>.

FENG, Z.-G.; MICHAELIDES, E. E. Drag Coefficients of Viscous Spheres at Intermediate and High Reynolds Numbers. **Journal of Fluids Engineering**, v. 123, n. 4, p. 841–849, mai. 2001.

FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M.; STREET, R. L. **Computational methods for fluid dynamics**. [S.l.]: Springer, 2002. v. 3.

FROEHLICH, J. D. Otimização do custo de aminas neutralizantes utilizadas em sistemas de topo de torres de destilação, 2017.

GERMANO, M. Turbulence: the filtering approach. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 238, p. 325–336, 1992.

GONÇALVES, J. C. **Estudo de corrosão em sistemas de topo de unidades de destilação de petróleo-avaliação em laboratório de inibidor de corrosão comercial e agentes neutralizantes**. 2007. Tese (Doutorado) – Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.

GOODWIN, D. G.; MOFFAT, H. K.; SPETH, R. L. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes, version 2.2. 1. **Cantera Developers, Warrenville, IL**, 2017.

GOODWIN, D. G.; MOFFAT, H. K.; SCHOEGL, I. et al. **Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes**. [S.l.: s.n.], 2022. <https://www.cantera.org>. Version 2.6.0. DOI: [10.5281/zenodo.6387882](https://doi.org/10.5281/zenodo.6387882).

HAYES, M. P. Developing Computationally Efficient Property Calculations for High-Pressure, Multi-Component Droplet Vaporization. In: 1. PROCEEDINGS of the Wisconsin Space Conference. [S.l.: s.n.], 2021. v. 1.

HUBBARD, G.; DENNY, V.; MILLS, A. Droplet evaporation: effects of transients and variable properties. **International journal of heat and mass transfer**, Elsevier, v. 18, n. 9, p. 1003–1008, 1975.

HUBER, M. L.; LEMMON, E. W.; BRUNO, T. J. Surrogate mixture models for the thermophysical properties of aviation fuel Jet-A. **Energy & Fuels**, ACS Publications, v. 24, n. 6, p. 3565–3571, 2010.

- JAMEEL, A. G. A.; NASER, N.; EMWAS, A.-H.; SARATHY, S. M. Surrogate formulation for diesel and jet fuels using the minimalist functional group (MFG) approach. **Proceedings of the combustion institute**, Elsevier, v. 37, n. 4, p. 4663–4671, 2019.
- JENNY, P.; ROEKAERTS, D.; BEISHUIZEN, N. Modeling of turbulent dilute spray combustion. **Progress in Energy and Combustion Science**, Elsevier, v. 38, n. 6, p. 846–887, 2012.
- JENNY, P.; ROEKAERTS, D.; BEISHUIZEN, N. Modeling of turbulent dilute spray combustion. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 38, n. 6, p. 846–887, 2012. ISSN 0360-1285. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2012.07.001>, Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360128512000445>.
- KABIL, I. et al. An improved prediction of pre-combustion processes, using the discrete multicomponent model. **Sustainability**, MDPI, v. 13, n. 5, p. 2937, 2021.
- KARTASHOV, E. Analytical methods in theory of heat conduction in solids (550 pp.) **Moscow: Vysshaya Shkola (in Russian)**, 2001.
- KIM, D.; MARTZ, J.; VIOLI, A. A surrogate for emulating the physical and chemical properties of conventional jet fuel. **Combustion and Flame**, Elsevier, v. 161, n. 6, p. 1489–1498, 2014.
- KIUSALAAS, J. **Numerical methods in engineering with Python 3**. [S.l.]: Cambridge university press, 2013.
- KLAUCK, F. Projeto de equipamento para simulação do topo de uma coluna de fracionamento de petróleo para controle de corrosão, 2015.
- LEBOISSETIER, A.; OKONG’O, N.; BELLAN, J. Consistent large-eddy simulation of a temporal mixing layer laden with evaporating drops. Part 2. A posteriori modelling. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 523, p. 37–78, 2005.
- LI, C.; CRUA, C.; VOGIATZAKI, K. Effect of the scale resolution on the two phase coupling characteristics of high speed evaporating sprays using LES/Eulerian-Lagrangian methodologies. **International Journal of Multiphase Flow**, Elsevier, v. 120, p. 103060, 2019.
- LI, J.; MASON, D. A computational investigation of transient heat transfer in pneumatic transport of granular particles. **Powder Technology**, Elsevier, v. 112, n. 3, p. 273–282, 2000.
- LILLY, D. K. A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. **Physics of Fluids A: Fluid Dynamics**, American Institute of Physics, v. 4, n. 3, p. 633–635, 1992.
- MARQUES, D. G. et al. **Efeito do tipo de neutralizante e ponto de injeção no processo corrosivo do sistema de topo da torre de destilação atmosférica de petróleo**. 2022. Diss. (Mestrado) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná.
- MELO, R. R. d. S. et al. Modelagem e simulação de escoamentos turbulentos com efeitos térmicos, utilizando a metodologia da fronteira imersa e malha adaptativa. Universidade Federal de Uberlândia, 2017.
- MICHAELIDES, E. **Particles, bubbles & drops: their motion, heat and mass transfer**. [S.l.]: World Scientific, 2006.

- MURAMATSU, H.; PILLAI, A. L.; KITADA, K.; KUROSE, R. Numerical simulation of bi-component fuel droplet evaporation using Level Set method. **Fuel**, Elsevier, v. 318, p. 123331, 2022.
- NETO, A. S. **Escoamentos Turbulentos - Análise Física e Modelagem Teórica**. 1. ed. Uberlândia-MG-Brasil: Composer, 2020. P. 653. ISBN 978-6599036514.
- PERRIN, L. **Etude expérimentale de l'évaporation à haute température de gouttes de combustible en régime de fortes interactions à l'aide de méthodes optiques**. 2014. Tese (Doutorado) – Université de Lorraine.
- PINHEIRO, A. P.; RYBDYLOVA, O. et al. Modelling of aviation kerosene droplet heating and evaporation using complete fuel composition and surrogates. **Fuel**, Elsevier, v. 305, p. 121564, 2021.
- 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, p. 537–558, 2019.
- PINHEIRO, A. P.; VEDOVOTO, J. M.; SILVEIRA NETO, A. da; WACHEM, B. G. van. Ethanol droplet evaporation: Effects of ambient temperature, pressure and fuel vapor concentration. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 143, p. 118472, 2019.
- PINHEIRO, A. P. et al. Eulerian-Lagrangian modelling of aviation kerosene spray breakup and evaporation. Universidade Federal de Uberlândia, 2022.
- PINHEIRO, A. P. et al. Lagrangian modeling of droplet evaporation. Universidade Federal de Uberlândia, 2018.
- POINSOT, T.; VEYNANTE, D. **Theoretical and numerical combustion**. [S.l.]: RT Edwards, Inc., 2005.
- POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P. **Properties of gases and liquids**. [S.l.]: McGraw-Hill Education, 2001.
- POULTON, L. et al. Modelling of multi-component kerosene and surrogate fuel droplet heating and evaporation characteristics: A comparative analysis. **Fuel**, Elsevier, v. 269, p. 117115, 2020.
- RANZ, W. E. Evaporation from drops: Part II. **Chemical Engineering Progress**, v. 48, n. 4, p. 173–180, 1952.
- RYBDYLOVA, O. et al. A model for droplet heating and its implementation into ANSYS Fluent. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 76, p. 265–270, 2016.
- SAMIMI ABIANEH, O.; CHEN, C. A discrete multicomponent fuel evaporation model with liquid turbulence effects. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 55, n. 23, p. 6897–6907, 2012. ISSN 0017-9310. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.07.003>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931012005303>.

- SANJOSÉ, M. **Evaluation de la méthode Euler-Euler pour la simulation aux grandes échelles des chambres à carburant liquide**. 2009. Tese (Doutorado).
- SANTOS, J. G. d. F. et al. Modelagem matemática e computacional de escoamentos gás-sólido em malha adaptativa dinâmica. Universidade Federal de Uberlândia, 2019.
- SAZHIN, S. **Droplets and sprays**. [S.l.]: Springer, 2014. v. 345.
- SAZHIN, S. S. Modelling of fuel droplet heating and evaporation: Recent results and unsolved problems. **Fuel**, Elsevier, v. 196, p. 69–101, 2017.
- SAZHIN, S. S.; AL QUBEISSI, M. et al. A multi-dimensional quasi-discrete model for the analysis of Diesel fuel droplet heating and evaporation. **Fuel**, Elsevier, v. 129, p. 238–266, 2014.
- SAZHIN, S. S.; ELWARDANY, A. et al. A simplified model for bi-component droplet heating and evaporation. **International Journal of heat and mass transfer**, Elsevier, v. 53, n. 21-22, p. 4495–4505, 2010.
- SAZHIN, S. S. Modelling of Droplet Heating and Evaporation. In: **Droplets and Sprays : Applications for Combustion and Propulsion**. Edição: Saptarshi Basu, Avinash Kumar Agarwal, Achintya Mukhopadhyay e Chetankumar Patel. Singapore: Springer Singapore, 2018. P. 45–75. ISBN 978-981-10-7449-3. DOI: [10.1007/978-981-10-7449-3_3](https://doi.org/10.1007/978-981-10-7449-3_3). Disponível em: https://doi.org/10.1007/978-981-10-7449-3_3.
- SAZHIN, S.; ELWARDANY, A.; SAZHINA, E.; HEIKAL, M. A quasi-discrete model for heating and evaporation of complex multicomponent hydrocarbon fuel droplets. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 54, n. 19-20, p. 4325–4332, 2011.
- 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.
- SILVA, C. M.; LIU, H.; MACEDO, E. A. Models for self-diffusion coefficients of dense fluids, including hydrogen-bonding substances. **Chemical engineering science**, Elsevier, v. 53, n. 13, p. 2423–2429, 1998.
- SILVA, G. P. D. M. da. **MODELAGEM TERMODINÂMICA DE ELETRÓLITOS PARA SISTEMAS DE TOPO DE UNIDADES DE DESTILAÇÃO DE PETRÓLEO**. 2017. Tese (Doutorado) – Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro (COPPE/UFRJ).
- SILVA, P. A. L. **Avaliação de corrosão em sistema de topo de torre fracionadora em unidades de coqueamento retardado**. 2023. B.S. thesis.
- SINGER, S. L.; HAYES, M. P.; COONEY, A. Y. A hybrid droplet vaporization-adaptive surrogate model using an optimized continuous thermodynamics distribution. **Fuel**, Elsevier, v. 288, p. 119821, 2021.
- SIRIGNANO, W. A. **Fluid dynamics and transport of droplets and sprays**. [S.l.]: Cambridge university press Cambridge, 2000. v. 2.

SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations: I. The basic experiment. **Monthly weather review**, American Meteorological Society, v. 91, n. 3, p. 99–164, 1963.

SONTHEIMER, M.; KRONENBURG, A.; STEIN, O. Grid dependence of evaporation rates in Euler–Lagrange simulations of dilute sprays. **Combustion and Flame**, v. 232, p. 111515, 2021. ISSN 0010-2180. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2021.111515>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218021002583>.

TALLEY, D.; YAO, S. A semi-empirical approach to thermal and composition transients inside vaporizing fuel droplets. In: ELSEVIER, 1. SYMPOSIUM (International) on Combustion. [S.l.: s.n.], 1988. v. 21, p. 609–616.

TONINI, S.; COSSALI, G. A novel formulation of multi-component drop evaporation models for spray applications. **International Journal of Thermal Sciences**, Elsevier, v. 89, p. 245–253, 2015.

TROPEA, M. C.; LEMOINE, M. F.; ENSEM, N. Contribution à la compréhension de l'évaporation de gouttes de combustible bi-composant à l'aide de méthodes optiques.

VEDOVOTO, J. M. **Mathematical and numerical modeling of turbulent reactive flows using a hybrid LES/PDF methodology**. 2011. Tese (Doutorado) – Chasseneuil-du-Poitou, Ecole nationale supérieure de mécanique et d ...

WANG, F. et al. Kerosene evaporation rate in high temperature air stationary and convective environment. **Fuel**, Elsevier, v. 211, p. 582–590, 2018.

WANG, P. et al. Development of a decoupling physical-chemical surrogate (DPCS) model for simulation of the spray and combustion of multi-component biodiesel fuels. **Fuel**, Elsevier, v. 240, p. 16–30, 2019.

WASSILJEWA. **Physik. Z.** [S.l.: s.n.], 1904. v. 5.

WILKE, C. A viscosity equation for gas mixtures. **The journal of chemical physics**, American Institute of Physics, v. 18, n. 4, p. 517–519, 1950.

WILKE, C.; LEE, C. Estimation of diffusion coefficients for gases and vapors. **Industrial & Engineering Chemistry**, ACS Publications, v. 47, n. 6, p. 1253–1257, 1955.

WON, S. H. et al. Reconstruction of chemical structure of real fuel by surrogate formulation based upon combustion property targets. **Combustion and Flame**, Elsevier, v. 183, p. 39–49, 2017.

YAWS, C. L. **Thermophysical properties of chemicals and hydrocarbons**. [S.l.]: William Andrew, 2008.

YAWS, C. L.; GABBULA, C. **Yaws"Handbook of thermodynamic and physical properties of chemical compounds**. [S.l.]: Knovel, 2003.

YAWS, C. Transport properties of chemicals and hydrocarbons: viscosity, thermal conductivity, and diffusivity of Cl to Cl00 organics and Ac to Zr inorganic. **William Andrew Inc**, 2009.

YU, J.; JU, Y.; GOU, X. Surrogate fuel formulation for oxygenated and hydrocarbon fuels by using the molecular structures and functional groups. **Fuel**, Elsevier, v. 166, p. 211–218, 2016.

YUEN, M. C.; CHEN, L. W. On Drag of Evaporating Liquid Droplets. **Combustion Science and Technology**, Taylor Francis, v. 14, n. 4-6, p. 147–154, 1976.