



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA, INOVAÇÕES E COMUNICAÇÕES
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

**EFEITO DA CONCENTRAÇÃO DE NANOPARTÍCULAS NA
VAPORIZAÇÃO DE GOTAS DE FERROFLUIDO E NANOFLUIDO:
MODELO PARA UM CALOR LATENTE EFETIVO**

RELATÓRIO FINAL DE PROJETO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA
(PIBIC/INPE/CNPq)

Jaime Bortoli Filho (UNIPAMPA, bolsista PIBIC)
jaime.paaz@gmail.com

Dr. Cesar Flaubiano da Cruz Cristaldo (UNIPAMPA, orientador)
cesarcristaldo@unipampa.edu.br

Dr. Fernando Fachini Filho (INPE, orientador)
fachini@lcp.inpe.br

Julho, 2019

Sumário

1	INTRODUÇÃO	7
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	8
2.1	Combustão	8
2.2	Combustão de gotas isoladas	8
2.3	Nanofluidos	8
2.4	Ferrofluidos	9
2.5	Aquecimento por relaxação magnética	9
3	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA	10
3.1	Hipóteses	10
3.2	Variáveis adimensionais	11
3.3	Equações de conservação	11
3.4	Análise da fase líquida	14
3.5	Análise da fase gasosa	16
4	CONCEITOS BÁSICOS DO MÉTODO SPH	18
4.1	Formulação matemática	18
4.1.1	Equações de Conservação	18
4.1.2	Aproximação discreta para um campo contínuo	19
4.1.3	Derivadas espaciais e operadores vetoriais	20
4.2	Discretização das equações	21
4.2.1	Equação da continuidade	22
4.2.2	Quantidade de movimento	22
4.2.3	Equação da energia	23
5	CONCLUSÃO E PRÓXIMOS PASSOS	24
6	REFERÊNCIAS	25

Lista de Figuras

1	Esquema do problema de estudo.	10
2	Ilustração esquemática do aquecimento na fase líquida.	13
3	Esquema da formação da camada limite térmica no interior da gota.	14

Lista de Tabelas

RESUMO

Neste trabalho é avaliado o aquecimento, a vaporização e combustão de uma gota de ferroídeo (líquido com nanopartículas dispersadas) sob influência de um campo magnético externo alternado. Em resposta ao campo magnético, a movimentação das partículas promove uma geração de calor no interior da gota devido à relaxação magnética, que opera como fonte de calor. A geração de calor ocorre devido ao atrito (dissipação viscosa) entre as nanopartículas e o fluido adjacente a elas. Este movimento é ocasionado devido a rotação das partículas em resposta à alternância do campo, que promove o alinhando e desalinhamento do dipolo das partículas, este movimento ocorre de maneira cíclica respondendo às propriedades do campo magnético. Desta forma, a presente análise considera dois mecanismos (fluxo de calor do ambiente externo e aquecimento magnético) fornecendo calor simultaneamente para o aquecimento e vaporização da gota. Esta análise considera um campo magnético de alta potência e uma distribuição uniforme das partículas, com isso, o interior da gota é homogeneamente aquecido. Contudo, ocorre a formação de uma camada limite térmica na interface entre as fases líquida e gasosa. Para a análise dos efeitos no interior da camada limite uma reescalação é realizada nas coordenadas espaciais e temporais. No presente modelo, a gota é aquecida até sua temperatura de ebulição de maneira muito rápida. Além disso, sob certas condições, a temperatura dentro da camada limite térmica torna-se maior que a temperatura na superfície, o que leva a gota a atingir a temperatura de ebulição em uma região no interior da gota e não na superfície. A diferença de temperatura entre a camada limite térmica e a superfície, ocasiona um fluxo de calor extra para a superfície, resultando num aumento na taxa de vaporização. .

Palavras-chave: Aquecimento Magnético. Combustão de gotas. Ferrofluidos.

EFFECT OF NANOPARTICLES CONCENTRATION ON VAPORIZATION OF FERROFLUID AND NANOFUID DROPLETS: A MODEL FOR EFFECTIVE LATENT HEAT

ABSTRACT

The present work aims to evaluate the heating, vaporization and combustion of a droplet of ferrofluid (liquid with dispersed nanoparticles) under the influence of an alternating external magnetic field. In response to the magnetic field, particle movement promotes heat generation within the droplet due to magnetic relaxation, which operates as a heat source. Heat generation occurs due to friction (viscous dissipation) between the nanoparticles and the fluid adjacent to them. This movement is caused due to the rotation of the particles in response to the field alternation, which promotes the alignment and misalignment of the particle dipole, this movement occurs in a cyclic manner responding to the magnetic field properties. Thus, the present analysis considers two mechanisms (external environment heat flux and magnetic heating) providing heat simultaneously for heating and vaporization of the droplet. This analysis considers a high power magnetic field and even particle distribution, so the inside of the droplet is homogeneously heated. However, a thermal boundary layer forms at the interface between the liquid and gas phases. For the analysis of the effects inside the boundary layer a rescaling is performed in the spatial and temporal coordinates. In the present model, the droplet is heated to its boiling temperature very quickly. In addition, under certain conditions, the temperature within the thermal boundary layer becomes higher than the surface temperature, which causes the drop to reach boiling temperature in a region within the drop rather than on the surface. The temperature difference between the thermal boundary layer and the surface causes an extra heat flux to the surface, resulting in an increase in vaporization rate. .

Keywords: Magnetic Heat. Droplet Combustion. Ferrofluids.

1 INTRODUÇÃO

O presente relatório tem como objetivo apresentar o desenvolvimento final do trabalho de iniciação científica, apoiado pelo programa de bolsas de iniciação científica CNPq e INPE, orientado por Fenando Fachini Filho e Cesar Flaubinado da Cruz Cristaldo.

O objetivo do estudo é analisar os efeitos do aquecimento magnético de uma gota de ferrofluido combustível. Especificamente, o presente modelo tem como objetivo estudar o processo de micro-explosão e vaporização da gota.

Neste sentido pretende-se estudar o fluido como um modelo de partículas conhecido como método SPH.

A seguir serão apresentadas as atividades desenvolvidas durante o período 2018 até 2019.

1. Estudo dos modelos clássicos de aquecimento, vaporização e combustão de gotas (sem nano partículas);
2. Estudos dos modelos clássicos de aquecimento, vaporização e combustão de gotas de ferrofluidos/nanofluidos;
3. Estudo da linguagem Fortran
4. Estudo de métodos numéricos para solução de problemas de transferência de calor;
5. Estudo do método PIC (PARTICLE-IN-CELL)
6. Estudo do método SPH (SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS)

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

O presente capítulo irá abordar a fundamentação teórica utilizada para a construção do trabalho, apresentando conceitos e fundamentos de combustão, posteriormente, a análise de uma gota isolada e logo após, a denição de nanouidos e ferrouidos. Após a apresentação desses conceitos serão abordados os fundamentos do aquecimento magnético.

2.1 Combustão

A combustão pode ser definida como uma reação química que libera energia na forma de calor. Conforme Turns (2013), os processos de combustão podem ocorrer com ou sem chama. A chama é denida como a estreita região de reação química. Na combustão sem chama não há uma região de reação química denida, sendo que essa se distribui em um volume .

Na combustão com chama há uma zona localizada de reação química em propagação autossustentada a velocidades subsônicas (Turns, 2013). Nesse sentido, entende-se que a chama ocupa uma pequena parte da mistura reagente, ou seja, uma região localizada que varia conforme o tempo (Zorzo *et al*, 2016).

2.2 Combustão de gotas isoladas

O estudo do aquecimento, vaporização e combustão de gotas isoladas, além de descrever um fenômeno físico real, é útil para compreender casos mais complexos, como combustão de gotas em spray. Isso se deve a sua relativa simplicidade de análise, que permite avançar gradativamente no entendimento dos fenômenos mais complexos envolvendo inúmeros parâmetros, como turbulência e interação entre gotas.

Os primeiros modelos de combustão foram desenvolvidos por Spalding (1953) e Godsave (1953). Esses estudos avaliaram gotas isoladas com geometria esférica e simétrica em um ambiente gasoso quiescente. Através destes estudos, dois mecanismos foram determinantes na taxa de redução do tamanho de uma gota em combustão de spray. O primeiro ocorre com a temperatura da gota e do ambiente basicamente iguais. Por outro lado, o segundo mecanismo ocorre quando há um gradiente de temperatura expressivo entre a gota e o ambiente (Zorzo *et al*, 2016).

2.3 Nanofluidos

Nano fluidos podem ser definidos como fluidos contendo uma suspensão de nanopartículas com diâmetro médio de 10nm (Chol, 1995). Esses fluidos são bastante atrativos tendo em vista que a mudança de suas propriedades físicas pode promover melhoramento considerável para diversas aplicações. Exemplos das propriedades que podem ser alteradas no fluido base, são a viscosidade, a condutividade térmica e a difusividade térmica, por exemplo (Chol, 1995; Rosenweig, 2002; Wong, De Leon, 2010).

2.4 Ferrofluidos

Segundo Cristaldo (2013) um nanofluido pode apresentar nanopartículas com propriedades magnéticas, neste caso ele passa a ser denominado ferrofluido ou nanofluido magnético. A grande vantagem desse tipo de fluido é a grande gama de aplicações que podem ser otimizadas devido ao controle fornecido sobre os parâmetros do campo magnético que irá interagir com as partículas, dentre essas propriedades estão a frequência do campo, a amplitude e a direção, por exemplo.

2.5 Aquecimento por relaxação magnética

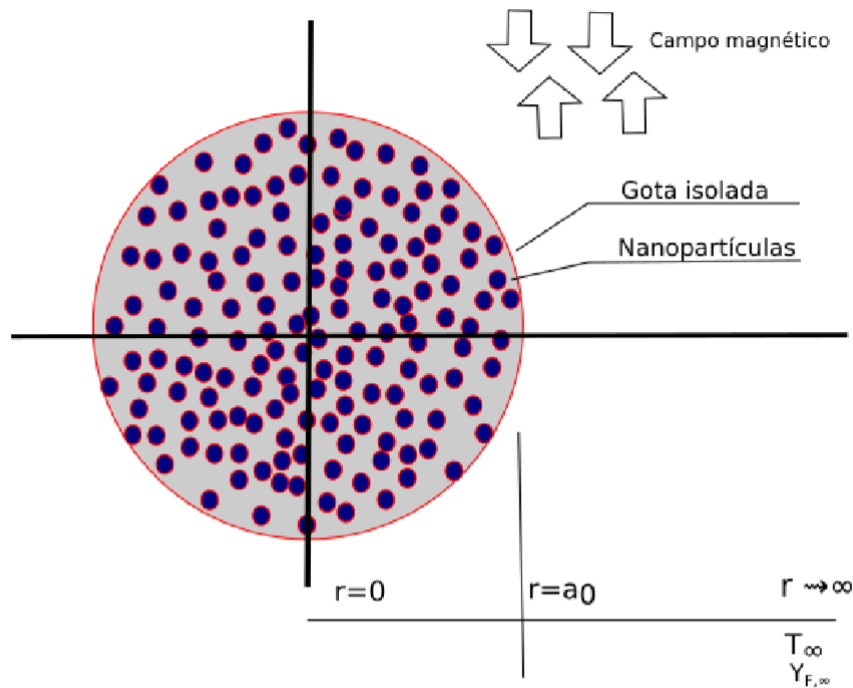
O aquecimento por relaxação magnética é baseado na energia dissipada pelas nanopartículas magnéticas quando o ferrofluido está sob a influência de um campo magnético externo alternado (Maenosono *et al* 2006; Kappiyoor *et al*, 2010). A dissipação de energia das nanopartículas é fornecida através de dois mecanismos: o de dissipação viscosa devido ao atrito provocado pela rotação da partícula magnética em um líquido circundante (mecanismo browniano) e o aumento da temperatura da nanopartícula devido à rotação do dipolo magnético dentro da nanopartícula (mecanismo de Néel). O parâmetro mais importante para a determinação da taxa de aquecimento das nanopartículas magnéticas é o tempo efetivo de relaxamento t_m^* , que depende dos tempos de relaxação de Néel e browniano, definidos respectivamente por t_N^* e t_B^* . Onde, o menor tempo de relaxamento determina o mecanismo de relaxamento dominante no processo. Nesta análise, assume-se a condição $t_B^* \ll t_N^*$, assim, o relaxamento ocorre principalmente devido ao mecanismo browniano (Cristaldo *et al*, 2013). Além disso, a distribuição das nanopartículas no interior da gota é considerada uniforme nesta análise.

Para uma alta fonte de calor magnético comparada àquela fornecida pelo fluxo de calor da fase gasosa, a temperatura no interior da gota é uniforme (Fachini *et al*, 2010). Na região próxima à superfície da gota, ambas as fontes de calor, aquecimento magnético e condução de calor da fase gasosa, tem a mesma intensidade. Conseqüentemente, uma camada limite térmica é estabelecida naquela região de interface líquido-gás durante o processo de aquecimento. Para acompanhar a evolução da camada limite térmica, é necessário redimensionar as coordenadas espaciais e temporais. A solução para a camada limite térmica corresponde à solução do núcleo de gotas para a fase de gás, que é quase estacionária (Gan *et al*, 2011). O movimento browniano das nanopartículas e a regressão da superfície das gotículas podem causar aglomeração de nanopartículas na superfície da gota durante a vaporização (Fachini, 1999), mas o processo de aglomeração não é levado em consideração nesta análise, como será demonstrado à frente. Vale ressaltar que a mudança na condutividade térmica devido à presença de nanopartículas no interior da gota também é negligenciada neste trabalho, tendo em vista que o objetivo é destacar apenas a influência do aquecimento magnético no aquecimento e vaporização da gota.

3 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

O problema de aquecimento e vaporização de uma gota líquida em ambiente quiescente possui simetria esférica, na qual a coordenada radial é a única que possui relevância. Essa coordenada tem origem no centro da gota, sendo o raio inicial da gota identificado por a_0 . Na região afastada da gota ($r \rightarrow \infty$) tem-se a temperatura do ambiente T_∞ e a fração mássica de vapor de combustível $Y_{F,\infty}$, que a uma distância infinita da gota pode ser considerada nula (Zorzo *et al*, 2016). A figura (1) ilustra o modelo a ser estudado.

Figura 1: Esquema do problema de estudo.



Fonte: Adaptado de Zorzo (2016).

Fisicamente, o calor é transferido do ambiente para a gota devido ao gradiente de temperatura entre as duas fases. A energia proveniente do ambiente somada com a energia produzida no interior da gota por dissipação viscosa, devido ao aquecimento magnético, são responsáveis pelo aquecimento e vaporização da gota. O vapor gerado na superfície da gota difunde-se para o ambiente, promovendo a redução de seu raio (Zorzo *et al*, 2016). A metodologia de análise e solução segue os procedimentos descritos anteriormente por Cristaldo e Fachini (2013).

3.1 Hipóteses

A gota se encontra isolada em meio infinito de baixa pressão e alta temperatura, promovendo uma massa específica da fase gasosa relativamente inferior a da fase líquida. Assim, assume-se que o ambiente é quase estacionário e dessa forma o processo pode ser descrito como se a difusão ocorresse em regime permanente (Cristaldo *et al*, 2013). Também, devido ao fato das altas temperaturas associadas a combustão resultarem em

massa específica relativamente baixas, a aproximação da fase gasosa com o comportamento de gás ideal é utilizada (Turns, 2013).

Admite-se uma mistura gasosa binária (vapor de combustível e gás ambiente), na qual a difusão de massa das espécies químicas ocorre de forma ordinária, ou seja, somente devido ao gradiente de concentração de massa. Dessa forma, a difusão de massa ocasionada pelos gradientes de temperatura (Soret) e de pressão são desprezados (Turns, 2013).

3.2 Variáveis adimensionais

No presente trabalho tem-se como variáveis adimensionais o tempo, a coordenada radial, a temperatura, a massa específica do gás ou do líquido, a velocidade do gás ou do líquido, a fração mássica de combustível e o raio da gota, os quais são respectivamente:

$$t \equiv \frac{t^*}{t_c^*} \quad r \equiv \frac{r^*}{a_0^*} \quad \theta \equiv \frac{T^*}{T_b^*} \quad \rho \equiv \frac{\rho^*}{\rho_\infty^*} \quad v \equiv \frac{v^* a_0^*}{\alpha_\infty^*} \quad Y_F \equiv Y_F^* \quad a \equiv \frac{a^*}{a_0^*} \quad (1)$$

Na qual o subscrito "*" representa a variável na forma dimensional, enquanto que os subscritos b e ∞ representam, respectivamente, a propriedade no instante de ebulição e na condição do ambiente (em uma região afastada da gota).

3.3 Equações de conservação

Onde as equações utilizadas para a solução deste problema são as de conservação de massa, de energia e de espécies químicas utilizadas em coordenadas esféricas unidimensionais. A seguir as equações serão apresentadas em sua forma dimensional e posteriormente serão adimensionalizadas. Essas equações podem ser obtidas por meio de balanços das propriedades extensivas requeridas em um volume de controle ou a partir do teorema de Reynolds.

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial t^*} + \nabla \cdot (\rho^* \vec{V}^*) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t^*} (\rho^* c^* T^*) + \nabla \cdot (r^{*2} \rho^* c^* T^* v^*) = \frac{1}{r^{*2}} \frac{\partial}{\partial r^*} \left(r^{*2} k^* \frac{\partial T^*}{\partial r^*} \right) \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t^*} (\rho_i^* Y_i^*) + \nabla \cdot (\rho_i^* Y_i^* \vec{V}^*) = \nabla \cdot (\rho_i^* D_i^* \nabla Y_i^*) + \dot{m}_i^{*'''} \quad (4)$$

As equações (2), (3) e (4), representam, respectivamente, as equações de conservação de massa, energia e espécies químicas. Estas são sujeitas a adimensionalização através da equação (1), de forma que, são expressas na seguinte forma

$$\epsilon \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho v) = 0 \quad (5)$$

sendo que $\epsilon = 1/\rho_l = \rho_\infty^*/\rho_l^*$

$$\frac{\rho_\infty^*}{\rho^*} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\theta) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 \rho v \theta) = \frac{c_p^*}{c^*} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{k^*}{k_\infty^*} \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) + \frac{t_c^*}{c^* \rho_l^* T_b^*} G^* \quad (6)$$

$$\epsilon \frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 \rho v Y_i) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r^2}{Le_F} \frac{\rho^* D_i^*}{\rho_\infty^* D_\infty^*} \frac{\partial Y_i}{\partial r} \right) + \epsilon \frac{t_c^*}{\rho^*} m_F^{*''} \quad (7)$$

Por meio da conservação de massa nas fases líquida e gasosa é possível obter a vazão mássica ou taxa de vaporização da gota. Permite-se com isso, estimar a variação do diâmetro da gota com o tempo, o qual, em problemas clássicos, decresce linearmente com o tempo (lei D^2) (Turns, 2013). Desta forma, a equação (5) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\frac{da^3}{dt} = -3\lambda \quad (8)$$

onde $\lambda(t) = m^* c_p^*/(4\pi k_\infty^* a_0^*)$ é a taxa de vaporização adimensional.

No presente caso de análise, considera-se a dissipação viscosa de energia promovida pelas nanopartículas magnéticas na presença de um campo magnético alternado como sendo a única fonte de energia, $G^* = P^*$. Além disso, considera-se que as propriedades da fase líquida (ρ_l , c_l e k_l) constantes, e que não ocorre convecção no interior da gota. Desta forma, a equação (6) pode ser expressa como

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{A}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) = P_m \frac{f^2 t_e(\theta)}{[f t_e(\theta)^2 + 1]} \quad (9)$$

onde $A \equiv c_p^* k_l^*/c_l^* k_\infty^*$ e $f = 2\pi f^* t_{eb}^*$ representa a frequência adimensional e segundo Rosensweig (2002). Por outro lado, $t_e(\theta) \equiv t_e^*/t_{eb}^* = 1/\theta$ é o tempo de relaxação adimensional em função da temperatura. Enquanto que P_m representa o parâmetro definido pela equação 10 (FACHINI, 2010).

$$P_m = \frac{\mu_0^* \chi_0^* H_0^{*2}/2}{\rho_l^* c_l^* T_b^*} \frac{t_c^*}{t_{eb}^*} \quad (10)$$

em que μ_0^* é a permeabilidade magnética ($\mu_0^* = 4\pi \times 10^{-7}$ Tm/A), H_0^* é a amplitude do campo magnético, enquanto que a suscetibilidade magnética χ_0^* é descrita conforme a equação de Langevin

$$\chi_0^* = \chi_i \frac{3}{\xi} \left(\coth \xi - \frac{1}{\xi} \right) \quad (11)$$

onde a suscetibilidade magnética inicial é dada por $\chi_i = \mu_0^* \phi M_d^{*2} V_N^*/(3\kappa^* T^*)$, enquanto que ϕ , M_d^* , V_N^* e κ^* são, respectivamente, a fração de nanopartículas no interior da gota,

o domínio de magnetização e a constante de Boltzmann ($\kappa^* = 1,38 \times 10^{-23}$ J/K). O parâmetro de Langevin é descrito por $\xi = \mu_0^* M_d^* H^* V_N^* / (\kappa^* T^*)$ em que a amplitude é dada por $H^* = H_0^* \cos(2\pi f^* t^*)$. Para a presente análise, a suscetibilidade magnética é assumida constante devido à fração de nanopartículas permanecer constante durante o período de aquecimento (Cristaldo *et al* 2013).

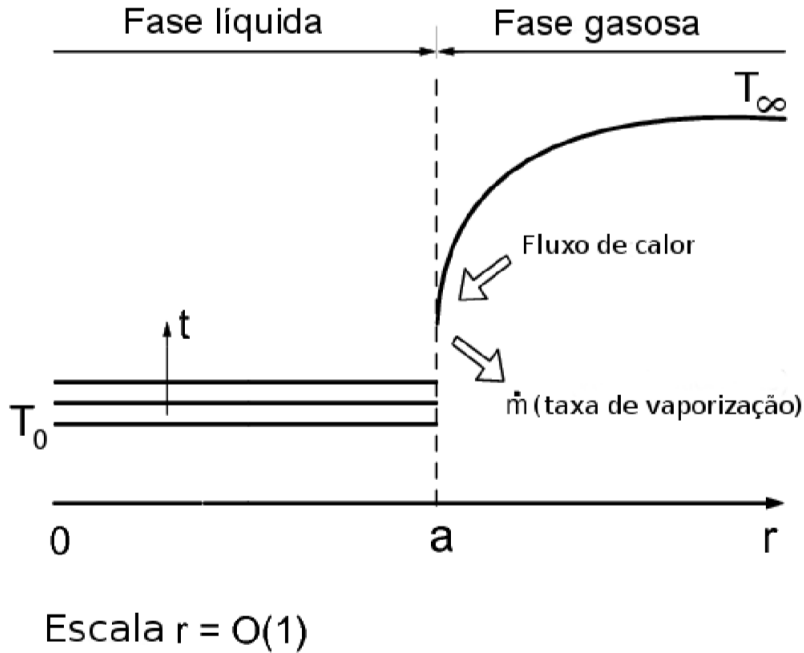
A potência gerada no interior da gota depende diretamente do tempo de relaxação efetivo t_m^* , este que está ligado aos mecanismos browniano e de Néel. Desta forma, o tempo efetivo de relaxação magnética é dado conforme a equação (12).

$$\frac{1}{t_m^*} = \frac{1}{t_B^*(T^*)} + \frac{1}{t_N^*(T^*)} \quad (12)$$

O tempo de relaxação browniano é dependente da temperatura e descrito por $t_B^*(T^*) = 3\eta^* V_H^* / (\kappa^* T^*)$. Onde η^* , V_H^* e κ^* representam a viscosidade, o volume hidrodinâmico e a constante de Boltzmann, respectivamente (Rosenweig, 2002). Além disso, o tempo de relaxação browniano t_B^* é adimensionalizado através do seu valor na temperatura de ebulição da gota, conforme $t_B = t_B^* / t_{B_b}^*$. Ressalta-se que, na presente análise o processo de aquecimento é realizado basicamente pelo mecanismo browniano, conforme Cristaldo e Fachini (2013).

A hipótese de que a potência magnética é muito maior que a potência térmica, $P_m \gg 1$, é assumida neste trabalho. Essa consideração é válida para campos magnéticos na ordem de $10^{-2} T$ (Fachini *et al*, 2010). Sob essas condições, o perfil de temperatura no interior da gota se mantém constante e varia apenas com o tempo. Conforme a figura (2)

Figura 2: Ilustração esquemática do aquecimento na fase líquida.



Fonte: Adaptado de Cristaldo (2013).

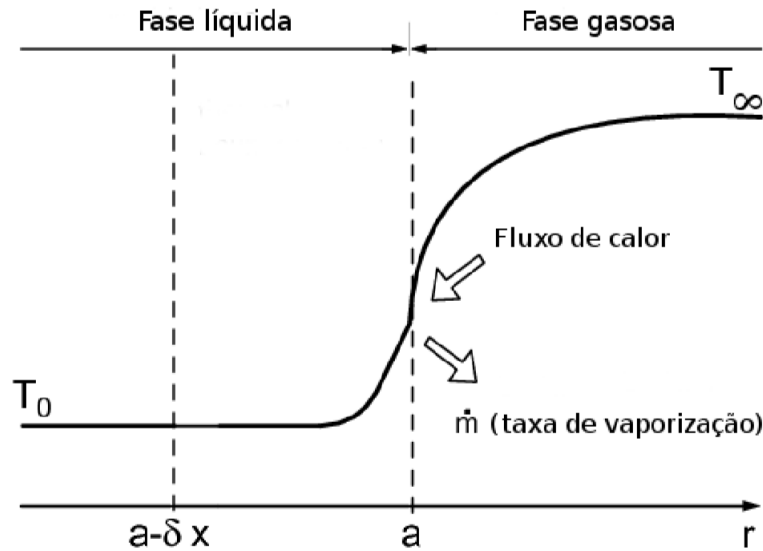
Contudo, na interface líquido-gás, ocorre uma variação tempo-espacial para satisfazer o gradiente de temperatura fornecido pelo fluxo de calor da fase gasosa. Conse-

quentemente, uma camada limite térmica é formada na região de interface da gota. Para observar o desenvolvimento da camada limite térmica, faz-se necessário uma alteração na escala de tempo e de espaço das equações (8) e (9).

3.4 Análise da fase líquida

Por análise, observa-se que a escala de tempo apropriada para a equação (9) é na ordem de $t \sim P_m^{-1}$, desta forma, a nova escala de tempo pode ser escrita como $\tau \equiv tP_m$, para $\tau = O(1)$. Além disso, uma mudança na variável espacial é necessária para descrever o perfil de temperatura na interface é necessária, assim sendo, a nova escala é dada por $r = a + \delta x$. Posteriormente será mostrado que a espessura $\delta \sim P_m^{-1/2} \ll 1$. Como comumente adotado, a espessura da camada limite térmica é estabelecida de δ e é descrita pela variável $x = 0(1)$. A mudança promovida pela alteração na escala das coordenadas é exemplificada na figura (3).

Figura 3: Esquema da formação da camada limite térmica no interior da gota.



Fonte: Adaptado de Cristaldo (2013).

A mudança de variáveis da equação (9) é realizada através da alteração de escala dos dois termos do lado esquerdo da equação. Para isto, realiza-se o seguinte processo.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial \tau}{\partial t} \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \frac{\partial x}{\partial t} \frac{\partial \theta}{\partial x} = P_m \frac{\partial \theta}{\partial \tau} - \frac{1}{\delta} \frac{\partial a}{\partial t} \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad (13)$$

Além disso,

$$\frac{A}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) = \frac{A}{(a + \delta x)^2} \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{(a + \delta x)^2} \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right] \quad (14)$$

Desta forma, como uma primeira aproximação utiliza-se

$$\frac{A}{a^2} \frac{1}{\delta} \frac{\partial}{\partial x} \left(a^2 \frac{1}{\delta} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = \frac{A}{\delta^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \quad (15)$$

Reunindo os termos e reorganizando a equação, tem-se que

$$P_m \frac{\partial \theta}{\partial \tau} - \frac{1}{\delta} \frac{\partial a}{\partial t} \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{A}{\delta^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + P_m \frac{f^2 \theta}{f^2 + \theta^2} \quad (16)$$

Realiza-se a divisão por P_m

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} - \frac{1}{\delta P_m} \frac{\partial a}{\partial t} \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{A}{\delta^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + P_m \frac{f^2 \theta}{f^2 + \theta^2} \quad (17)$$

Para o caso onde $\delta \sim P_m^{-1/2}$, a equação torna-se

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} - \frac{1}{P_m^{1/2}} \frac{\partial a}{\partial t} \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{A}{\delta^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{f^2 \theta}{f^2 + \theta^2} \quad (18)$$

Por análise, para $P_m \gg 1$ e $\delta = (A/P_m)^{1/2}$, o termo (A/δ^2) torna-se de ordem unidade, enquanto que $P_m^{-1/2} \ll 1$ em função de que $da/d\tau \sim P_m^{-1}$ para $a \sim 1$. Desta forma, os efeitos convectivos devido à variação de raio são desprezíveis para $a \gg P_m^{-1/2}$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{A}{\delta^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{f^2 \theta}{f^2 + \theta^2} \quad (19)$$

Portanto obtém-se que, as equações (8) e (9) reescritas nas novas variáveis x e τ são expressas pelas equações (20) e (21), respectivamente.

$$\frac{da^3}{d\tau} = -3 \frac{\lambda}{P_m} \quad (20)$$

e

$$\frac{\partial \theta}{\partial \theta} - \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} = \frac{f^2 \theta}{\theta^2 + f^2} \quad (21)$$

As equações anteriormente apresentadas e as seguintes condições de contorno

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = 0 \quad \text{para} \quad x \rightarrow -\infty \quad (22)$$

e

$$a^2 \theta^n \left(\frac{\partial \theta}{\partial r} \right)_{a^+} = (AP_m)^{1/2} a^2 \left(\frac{\partial \theta}{\partial r} \right)_{x=0^-} + \lambda L \quad \text{em} \quad r = a \quad (23)$$

descrevem o perfil da temperatura no interior da camada limite térmica. Para esta análise, a condutividade térmica na fase gasosa é considerada como função da temperatura, conforme, $k_g/k_{g\infty} = \theta^n$, com $n = 0, 5$. O calor latente de vaporização adimensional é definido por $L \equiv L^*/(c_p T_b)$, onde L^* é o calor latente de vaporização. A equação (23), representa a conservação de energia na superfície da gota, desta forma, parte do calor fornecido pelo ambiente é utilizado para o aquecimento da gota e parte é utilizado para a vaporização da mesma.

3.5 Análise da fase gasosa

Nessa seção é apresentado uma descrição sucinta da modelagem matemática da fase gasosa. As equações de conservação de energia, massa e espécies químicas são aplicadas ao gás ambiente, sendo demonstrado a implicação de algumas das hipóteses ao problema. Com base no fluxo radial da fase gasosa da gota para o ambiente, as equações de conservação da fase gasosa são apresentadas abaixo (FACHINI, 1999)

$$\epsilon P_m \frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho u) = 0 \quad (24)$$

$$\epsilon P_m \rho \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \rho u \frac{\partial \theta}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \theta^n \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) = 0 \quad (25)$$

$$\epsilon P_m \frac{\partial Y}{\partial \tau} + \rho u \frac{\partial Y}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r^2 \theta^n}{L_e} \frac{\partial Y}{\partial r} \right) = 0 \quad (26)$$

onde Y representa a fração mássica de vapor e L_e é o número de Lewis. O presente trabalho considera condições de baixa pressão, desta forma $\epsilon \equiv \rho_\infty/\rho_l$ é um termo desprezível, de maneira que $\epsilon P_m \ll 1$ ainda é satisfeito. Com isso, a fase gasosa pode ser aproximada por um regime quase estacionário. Portanto, as equações podem ser reescritas da seguinte forma

$$r^2 \rho u = \lambda \quad (27)$$

$$\frac{\lambda}{r^2} \frac{\partial \theta}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \theta^n \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) = 0 \quad (28)$$

$$\frac{\lambda}{r^2} \frac{\partial Y}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r^2 \theta^n}{L_e} \frac{\partial Y}{\partial r} \right) = 0 \quad (29)$$

As condições de contorno na superfície da gota são descritas pela equação (23) e

$$-\frac{r^2\theta^n}{L_e} \frac{\partial Y}{\partial r} = \lambda(1 - Y_s), \quad \text{em} \quad r = a^+ \quad (30)$$

O subscrito + representa a condição da superfície no lado gasoso, enquanto que Y_s representa a fração mássica de vapor na superfície da gota. Em uma região distante da gota, tem-se as seguintes condições de contorno

$$\theta = \theta_\infty, \quad \text{e} \quad Y = 0 \quad \text{em} \quad r \rightarrow \infty \quad (31)$$

Na interface das fases líquida e gasosa, considera-se que o líquido e o vapor estejam em equilíbrio. Portanto, a relação de Clausius-Clapeyron

$$Y_s = \exp[\gamma(1 - \theta_b/\theta_s)] \quad (32)$$

pode ser utilizada para relacionar a fração mássica de vapor na superfície Y_s com a temperatura da superfície θ_s , onde $\gamma \equiv L^*M_w/(R_gT_b^*)$ depende do peso molecular do líquido M_w e da constante universal dos gases R_g .

As equações (33) e (34) podem ser integradas analiticamente utilizando as condições de contorno expressas pelas equações (30) e (31), de maneira que resultem no seguinte sistema

$$\frac{\partial \theta}{\partial r} = \frac{\lambda(\theta - \theta_s + L) + Q^-}{r^2\theta^n} \quad (33)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial r} = \frac{\lambda(1 - Y)L_e}{r^2\theta^n} \quad (34)$$

onde $Q^- \equiv (A/P_m)^{1/2}a^2(\partial\theta/\partial x)_{x=0^-}$ representa o fluxo de calor da superfície para a região interna da gota.

4 COCNCEITOS BÁSICOS DO MÉTODO SPH

Duas abordagens principais para simulações computacionais evoluíram para permitir estas simulações numéricas. Os métodos eulerianos usam malhas geométricas, fixas ou adaptativas, com os parâmetros de fluido avaliados sobre as células da grade. Tais códigos formaram a base do revolução de CFD que começou no final dos anos 1960 e início dos anos 1970, e, como tal, continuam a ser a abordagem mais utilizada.

Segundo Cossins (2010), os métodos Lagrangeanos, por outro lado, dispensam pontos fixos no espaço e, em vez disso, desenvolvem as equações de fluido em um quadro em movimento. Uma abordagem comum é usar partículas discretas que são transportadas com as propriedades hidrodinâmicas (e outras) e, em seguida, são avaliadas nas posições das partículas, e são calculadas a partir de uma média ponderada dos valores em outras partículas locais. Desta maneira, cada partícula é essencialmente “suavizada” sobre um volume finito de massa fixa e, dessa forma, esses chamados códigos SPH e são naturalmente adaptáveis com a densidade.

4.1 Formulação matemática

Esta seção será utilizada para apresentar detalhadamente o desenvolvimento da formulação matemática utilizada para o método SPH. Para facilitar o entendimento, os processos serão fragmentados em parcelas que envolverão desde a apresentação das equações dos fluidos até a discretização das mesmas.

4.1.1 Equações de Conservação

De maneira a simplificar de modo que as equações permitam a criação de um algoritmo capaz para resolver problemas de mecânica dos fluidos, considera-se apenas o caso de um escoamento compressível, invíscido e na ausência de forças de corpo, de modo que efeitos gravitacionais e viscosos sejam posteriormente incluídos na análise. Assim sendo, faz-se um compilado das principais equações utilizadas e apresentadas na sua forma padrão.

A equação da continuidade (conservação da massa) é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (35)$$

onde ρ é a massa específica, t é o tempo e \mathbf{v} é o vetor velocidade.

A equação de Euler fornece as equações de conservação de quantidade de movimento para o caso de um fluido invíscido. Para o caso da ausência de forças de corpo,

tem-se

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{\nabla P}{\rho} \quad (36)$$

onde P é a pressão. A conservação de energia é expressa da seguinte forma

$$\frac{\partial E}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) E = \frac{ds}{dt} - \frac{P}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (37)$$

onde E representa a energia do fluido. Para o caso de escoamentos isentrópicos, s é constante e portanto $ds/dt = 0$.

4.1.2 Aproximação discreta para um campo contínuo

A base do formalismo do método SPH foi proposta por Lucy (1977), Gingold & Monaghan (1977, 1982) e Monaghan (1985), e é a discretização de um campo contínuo em uma série de partículas levando em consideração os erros que envolvem esta aproximação. Partindo da seguinte identidade

$$f(\mathbf{r}) = \int_V f(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (38)$$

onde f é uma função escalar qualquer definida em um sistema de coordenadas tridimensional \mathbf{r} variando sobre um volume V . Da mesma forma, δ é a função Delta de Dirac enquanto que \mathbf{r}' é uma variável fictícia que também varia sobre V . A função δ pode ser generalizada por uma função de suavização kernel W com um comprimento característico h (denominado comprimento de suavização), de tal forma que

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (39)$$

que está sujeita à seguinte normalização

$$\int_V W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' = 1 \quad (40)$$

Portanto, a equação (38), pode ser expressa como

$$f(\mathbf{r}) \approx \int_V f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' \quad (41)$$

da mesma forma, a equação (41) pode ser reescrita como

$$f(\mathbf{r}) \approx \int_V \frac{f(\mathbf{r}')}{\rho(\mathbf{r}')} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (42)$$

Discretiza-se então o campo contínuo em uma série de partículas, de massa $m = \rho(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'$, desta forma, a equação (42) pode ser aproximada da seguinte maneira

$$f(\mathbf{r}) \approx \sum_i \frac{m_i}{\rho_i} f(\mathbf{r}_i) W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, h) \quad (43)$$

onde $f(\mathbf{r}_i)$, ρ_i e m_i representam, respectivamente, o valor do escalar, a massa específica e a massa da i -ésima partícula enquanto que o i alcança todas as partículas dentro do kernel W . Desta forma, a equação representa o valor da função f , na posição r dentro do domínio computacional V e representa a base para todo o formalismo do método SPH.

4.1.3 Derivadas espaciais e operadores vetoriais

A fim de facilitar o entendimento das discretizações que serão realizadas posteriormente, evidentemente que todas as derivadas de quaisquer grandezas também deverão ser discretizadas de maneira adequada. Desta forma, todas as operações matemáticas necessárias para a formulação serão apresentadas a seguir

- Gradiente de um campo escalar

O gradiente de um campo escalar é obtido derivando a equação (38) em relação às coordenadas espaciais, desta forma

$$\nabla f(\mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \int_V f(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (44)$$

$$\nabla f(\mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \int_V f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' \quad (45)$$

Dado que o único termo que depende de \mathbf{r} é W , e introduzindo novamente a massa específica $\rho(\mathbf{r}')$ no numerador e no denominador, obtém-se

$$\nabla f(\mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \int_V \frac{f(\mathbf{r}')}{\rho(\mathbf{r}')} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (46)$$

Por fim, a equação pode ser discretizada como anteriormente, e torna-se

$$\nabla f(\mathbf{r}) \approx \sum_i \frac{m_i}{\rho_i} f(\mathbf{r}_i) \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, h) \quad (47)$$

assim, obtém-se então uma estimativa para o gradiente de um campo escalar $f(\mathbf{r})$. Segundo Cossins (2010), o gradiente também pode ser representado da seguinte maneira

$$\nabla f(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) \sum_i m_i \left(\frac{f(\mathbf{r})}{\rho(\mathbf{r})^2} + \frac{f(\mathbf{r}_i)}{\rho(\mathbf{r}_i)^2} \right) \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, h) \quad (48)$$

Esta função será utilizada para estimar o gradiente de pressão $(\nabla P)/\rho$ posteriormente, uma vez que garante a conservação de movimento.

- Divergente de um campo vetorial

Assim como realizado anteriormente, utiliza-se uma identidade para definir um campo vetorial $\mathbf{F}(\mathbf{r})$

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \int_V \mathbf{F}(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (49)$$

Obtendo o divergente do campo vetorial \mathbf{F} e como o único termo dependente de \mathbf{r} é W , obtem-se a seguinte integral como aproximação

$$\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}) = \int_V \mathbf{F}(\mathbf{r}') \cdot \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) d\mathbf{r}' \quad (50)$$

e com isso, após a discretização obtem-se

$$\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}) \approx \sum_i \frac{m_i}{\rho_i} \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) \cdot \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, h) \quad (51)$$

Da mesma maneira que na equação (50), o divergente pode ser expresso da seguinte maneira

$$\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}) \approx \rho(\mathbf{r}) \sum_i m_i \left(\frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}_i)}{\rho(\mathbf{r}_i)^2} + \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r})}{\rho(\mathbf{r})^2} \right) \cdot \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, h) \quad (52)$$

- Rotacional de um campo vetorial

De maneira análoga aos procedimentos anteriores à aproximação do rotacional de um campo vetorial é dada por

$$\nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{r}) \approx \sum_i \frac{m_i}{\rho_i} \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) \times \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, h) \quad (53)$$

4.2 Discretização das equações

Esta seção será utilizada para tratar a discretização das equações da continuidade, quantidade de movimento e energia, individualmente e de maneira que simplifique o entendimento. Por fim de praticidade, esta análise considera o comprimento de suavização h constante ($dh/dt = 0$) e que este é o mesmo para todas as partículas. Além disso, a massa de todas as partículas é mantida constante e todas as partículas possuem massa igual. Para o desenvolvimento do equacionamento, adotará-se uma igualdade no lugar da aproximação, uma vez que trata-se de uma discretização de um meio contínuo e será admitido que há igualdade entre as quantidades de ambos os lados das equações.

4.2.1 Equação da continuidade

Através da equação (43), facilmente obtém-se uma expressão para a massa específica ρ_j da partícula j , desta forma

$$\rho_j = \sum_i m_i W_{ji} \quad (54)$$

onde $W_{ji} = W(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)$, e, por simetria, $W_{ji} = W_{ij}$.

Realizando a derivada completa da equação (54) em relação ao tempo, obtém-se

$$\frac{d\rho_j}{dt} = \sum_i m_i \left[\frac{\partial W_{ji}}{\partial \mathbf{r}_j} \cdot \frac{d\mathbf{r}_j}{dt} + \frac{\partial W_{ji}}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} + \frac{\partial W_{ji}}{\partial h} \cdot \frac{dh}{dt} \right] \quad (55)$$

onde

$$\frac{d\mathbf{r}_j}{dt} = \mathbf{v}_j, \quad \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \quad \frac{dh}{dt} = 0$$

desta forma, a equação (55), pode ser reorganizada como

$$\frac{d\rho_j}{dt} = \sum_i m_i (\mathbf{v}_j \cdot \nabla W_{ji} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla W_{ji}) \quad (56)$$

4.2.2 Quantidade de movimento

Existem diversas formas para realizar a discretização da equação da quantidade de movimento, contudo, neste estudo, adotará-se a forma semelhante à proposta por Monaghan (1992), uma vez que a equação (48), basicamente resolve este problema. Desta forma

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{\nabla P}{\rho} \quad (57)$$

Utilizando a identidade

$$-\frac{\nabla P}{\rho} = -\nabla \left(\frac{P}{\rho} \right) - \frac{P}{\rho^2} \nabla \rho \quad (58)$$

Portanto, determina-se

$$\frac{d\mathbf{v}_j}{dt} = -\sum_i m_i \left(\frac{P_j}{\rho_j^2} + \frac{P_i}{\rho_i^2} \right) \nabla W(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i, h) \quad (59)$$

4.2.3 Equação da energia

A discretização da equação de conservação de energia é realizada utilizando as equações (37) e (51), desta forma

$$\frac{dE_j}{dt} = \frac{P_j}{\rho_j^2} \sum_i m_i \mathbf{v}_{ji} \cdot \nabla_i W_{ji} \quad (60)$$

sendo que $\mathbf{v}_{ji} \equiv \mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i$.

5 CONCLUSÃO E PRÓXIMOS PASSOS

O presente trabalho finalizou a primeira metade de uma pesquisa apoiada pelo Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais. O trabalho visa estudar modelos clássicos de combustão e modelos de combustão de ferrofluidos, de maneira a implementar novos conceitos para expandir os modelos já propostos em trabalhos anteriores, este projeto visa aplicar o estudo de microexplosões geradas pelo aumento de temperatura na camada limite térmica como uma nova maneira de atomização de gotas em sprays. A primeira etapa era constituída de estudos sobre os principais trabalhos propostos para os modelos clássicos de combustão, bem como o estudo sobre modelos que envolvam aquecimento de gotas de ferrofluidos além do estudo do método SPH (Smoothed Particles Hydrodynamics). Ao final desta etapa, o trabalho é expandido à uma formulação matemática aos processos envolvidos na vaporização e microexplosão de gotas devido a presença do aquecimento por relaxação magnética. Posteriormente, uma solução numérica será proposta ao modelo que será desenvolvendo e ainda pretende-se estender a solução ao modelo que será desenvolvido conforme o formalismo do método SPH. A utilização de um método Lagrangeano permitirá avaliar possíveis otimizações para o desenvolvimento de novos métodos de solução de problemas envolvendo combustão de gotas isoladas.

6 REFERÊNCIAS

- CHOL, S. 1995. ASME-Publications-Fed, ASME, v. 231, p. 99–106.
- Cossins, P. J. 2010. PhD Thesis 78-95.
- Cristaldo, C. F. C.; Fachini, F. F. 2013. *Physics of Fluids*, 25: 037101.
- Gan, Y., Qiao, L. 2011. *Combust. Flame* 158: 354.
- Gingold, R. A., Monaghan, J. J. 1982. *J. Comput. Phys.* 46: 429
- Gingold, R. A., Monaghan, J. J. 1977. *MNRAS* 181 : 375.
- Godsave, G. A. E. 1953. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 4, p. 818–830.
- Fachini, F. F. 1999. *Combust. Flame* 116: 302.
- Fachini, F. F., Liñán, A., Williams, F. A. 1999. *AIAA J.* 37: 1426.
- Fachini, F. F., Bakuzis A. F. 2010. *J. Appl. Phys.* 108: 084309.
- Kappiyoor, R., Liangruksa, M., Ganguly, R., Puri, I. K. 2010. *J. Appl. Phys.* 108: 094702.
- Lucy, L. B. 1977. *Astron. J.* 82: 1013
- Maenosono, S., Saita, S. 2006. *IEEE Trans. Magn.* 42: 1638.
- Monaghan, J. J. 1982. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 3: 422
- Monaghan, J. J. 1985. *Comput. Phys. Rep.* 3(2): 71
- Monaghan, J. J. 1992, *ARAA* 30, 543.
- Spalding, D. B. 1953. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 4, p. 847–864.
- Price, A J. 2012., *J. Comput. Phys* 759-794.
- Turns, S. R. **Introdução à Combustão: Conceitos e Aplicações**. [S.l.]: AMGH Editora, 2013
- Zorzo, R.; Cristaldo, C. F. C.; Fachini, F., 2016. **Aquecimento e Combustão de Gotas de Ferrofluido Combustível**. Relatório final de projeto de iniciação científica PIBIC.
- WONG, K. V.; De Leon, O. *Applications of nanouids: Current and future*. 2010.