

ANÁLISE DA INFLUÊNCIA GEOMÉTRICA DO REATOR DE PIRÓLISE EM SPRAY
FLAMEJANTE NA FORMAÇÃO DE NEGRO DE FUMOFABIO H. BASTIANI¹, PEDRO BIANCHI NETO¹, DIRCEU NORILER^{1*}

¹Universidade Estadual de Campinas, Departamento de Engenharia de Processos,
Faculdade de Engenharia Química
*e-mail: dnoriler@unicamp.br

RESUMO – O negro de fumo é um material carbonáceo gerado a partir da decomposição de hidrocarbonetos em processos de pirólise. Este pó de carbono possui partículas de escala nanométrica (10 – 500 nm) e é aplicado em diferentes áreas da indústria química. Sua principal função atualmente é como reforçador da borracha na produção de pneus, entretanto é usado na fabricação de baterias de alto desempenho e supercapacitores. Para tais aplicações as partículas devem possuir características favoráveis, como uma distribuição de tamanhos estreita e estrutura cristalina. O processo de pirólise em *spray* flamejante (FSP) é capaz de produzir nanopartículas altamente complexas e com controle sobre suas características. Neste trabalho é simulada a formação de negro de fumo em um reator FSP de geometria cilíndrica e com base cônica, utilizando um modelo de balanço populacional monodisperso de três equações. Os resultados sugerem que as diferenças observadas nos perfis de velocidade e recirculação de gás modificam a dinâmica de partículas dentro do reator. O reator cilíndrico apresenta maior formação de negro de fumo. Contudo, o tamanho de partícula não é afetado de forma significativa entre os casos, indicando que o modelo é sensível às condições de operação e não às quantidades formadas dentro do reator.

INTRODUÇÃO

O negro de fumo (*carbon black*) é um material fabricado sob condições controladas composto por partículas ultrafinas de carbono (10 – 500 nm). Atualmente, grande parcela de sua produção é concentrada em aplicações relacionadas com a borracha (reforçador de borracha em pneus, produtos mecânicos automotivos que usam borracha etc.). A parcela menor é destinada para aplicações diversas como produção de tintas, revestimentos, aditivo de baterias e supercapacitores (Jiang et al., 2021; Sebok & Taylor, 2001).

Este material é produzido a partir de decomposição incompleta de hidrocarbonetos em altas temperaturas, formando agregados de pequenas partículas primárias esféricas com uma microestrutura grafitica paracristalina. Diferentes métodos e combustíveis podem ser utilizados para fabricação do negro de fumo. Os

métodos mais estudados e utilizados ao longo dos anos são: (i) *Thermal black*; (ii) *Acetylene black*; (iii) *Channel black*; (iv) *Lamp black* e; (v) *Furnace black* (Donnet et al., 1993). Cada método produtivo possui diferentes características e combustíveis, variando desde petróleo e gás natural até etileno e acetileno puros (Sebok & Taylor, 2001).

Na literatura existe uma distinção entre negro de fumo e fuligem (*soot*). Por mais que sejam materiais similares – pós ultrafinos de carbono – diferem principalmente em pureza e método produtivo. A fuligem é considerada um subproduto de processos de combustão e geralmente é indesejado, afetando a dinâmica do processo e rendimento do produto principal. Para o negro de fumo as condições de operação são controladas para favorecer sua formação (Watson & Valberg, 2001).

Características fundamentais das nanopartículas de negro de fumo, como estrutura

cristalina e distribuição de tamanhos das partículas, devem ser controlados para que o material seja direcionado para aplicações específicas (como supercapacitores e baterias de alto desempenho). O processo de pirólise em *spray* flamejante (*Flame Spray Pyrolysis – FSP*) é capaz de produzir nanopartículas altamente complexas em um ambiente controlado, buscando sintetizar partículas com características favoráveis para sua aplicação. O processo consiste na injeção de uma corrente líquida, contendo combustível e precursor, que é atomizada formando um *spray* de finas gotículas. O *spray* é disperso por correntes de gás (oxigênio/nitrogênio) alimentadas na base do reator. A entalpia liberada por meio de uma chama piloto permite a evaporação das gotículas e a queima do combustível. Desta maneira ocorre a conversão do precursor em partículas (Meierhofer et al., 2020; Noriler et al., 2014).

No trabalho de Bianchi Neto *et al.* (2020), os autores estudam a formação de partículas de óxido de zircônia (ZrO_2) em um reator FSP por meio de fluidodinâmica computacional e um modelo de balanço populacional bivariado polidisperso. É utilizada uma abordagem Euleriana-Lagrangeana-Euleriana para as fases gasosa, líquida e sólida, respectivamente. São resolvidas equações de conservação de massa, momento, energia e espécies químicas dentro do domínio computacional. O modelo de balanço populacional é resolvido com auxílio do método direto da quadratura dos momentos. Perfis experimentais de temperatura e tamanho de partícula indicam que a modelagem matemática aplicada é capaz de representar o processo de formação das partículas de ZrO_2 no reator.

No trabalho de Buss *et al.* (2020), os autores estudam diferentes geometrias e diâmetros de reatores FSP para a síntese de óxido de zircônia. Geometrias cônicas na base do reator são comparadas com reatores cilíndricos para diferentes diâmetros e vazões de *co-flow*. Os autores concluem que o uso de uma geometria cônica impacta diretamente nos perfis de temperatura, nas zonas de recirculação e no tempo de residência das partículas. Tal fato traz motivação para o estudo de diferentes geometrias e condições de operação em um reator FSP na formação de negro de fumo.

Neste trabalho, buscamos modelar numericamente a síntese de nanopartículas de negro

de fumo em um reator de pirólise em *spray* flamejante. São comparadas geometrias cilíndrica e cônica na base do reator, para avaliar a formação do nanomaterial no processo FSP utilizando *p*-xileno como combustível.

METODOLOGIA

Nesta seção do trabalho são descritos os procedimentos metodológicos empregados para simulação da formação de negro de fumo no reator de pirólise em *spray* flamejante. Primeiramente, são apresentados os detalhes geométricos e condições de contorno da malha numérica. Em seguida são descritas a modelagem da fase contínua e discreta, assim como o modelo de três equações de formação de negro de fumo.

Malhas numéricas e geometria do reator

Na Figura 1 são apresentadas as geometrias e malhas numéricas consideradas nas simulações. O reator possui 100 mm de diâmetro e 500 mm de altura. Na geometria de base cônica o reator possui diâmetro de 38 mm na base. As malhas foram construídas no *software* ANSYS ICEM 19.2 pelo método de blocagem e possuem aproximadamente 200.000 elementos hexaédricos. Neste trabalho são utilizadas malhas de 2 dimensões com condição de axisimetria.

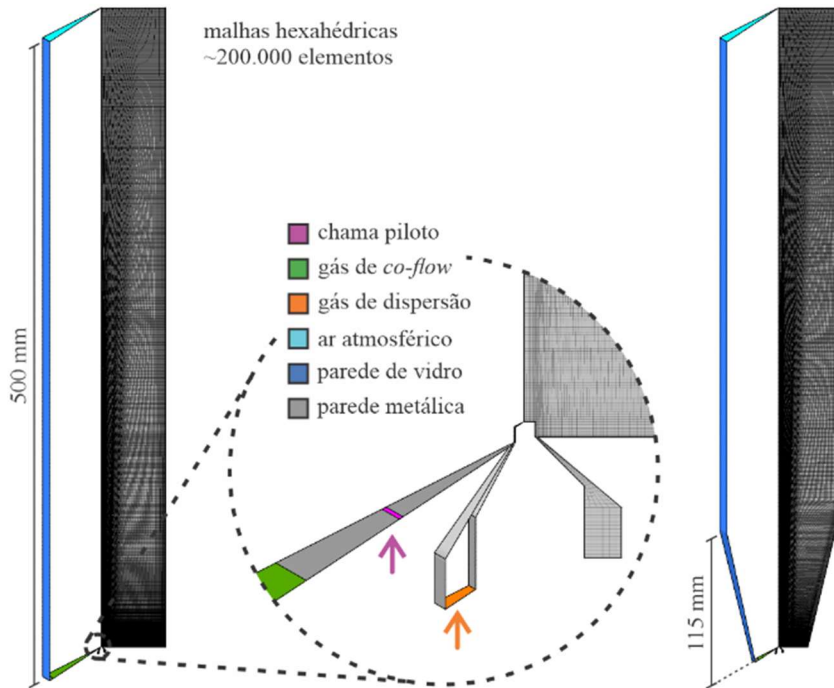
Condições de contorno: Como observado na Figura 1, existem 3 contornos de entrada, 2 de parede e 1 de saída no domínio computacional. As entradas são descritas a seguir:

- Chama piloto: *mass-flow-inlet* com 3,2 L/min de CH_4 e 1,5 L/min de O_2 ;
- Gás de *co-flow*: *mass-flow-inlet* com 40 L/min de ar;
- Gás de dispersão: *mass-flow-inlet* com 5 L/min de N_2 .

As paredes (do bico e do tubo) e a placa metálica são representadas por condição de não-deslizamento e condição térmica de fluxo de calor zero (adiabática).

A saída é representada por um contorno do tipo *pressure-outlet* e a injeção de combustível é descrita em detalhes na modelagem da fase discreta.

Figura 1. Malhas computacionais e geometria do reator FSP.



Modelagem matemática

Nesta seção, apresentamos a modelagem matemática da fase gasosa, líquida e sólida. Uma abordagem Euleriana-Lagrangeana-Euleriana é aplicada para modelar os fenômenos envolvidos no processo. É considerado um acoplamento de duas vias entre as fases gasosa e líquida. A transferência entre fases é considerada e a fase gasosa é assumida como ideal.

Fase gasosa: As equações diferenciais parciais que governam o processo são discretizadas pelo método dos volumes finitos e resolvidas pelo *software* comercial ANSYS Fluent 19.2. São resolvidas as equações de conservação massa, momento, energia e espécies químicas. A radiação é considerada nas equações de energia pelo modelo P1. A turbulência é representada por equações do tipo RANS (*Reynolds Average Navier-Stokes*) e é considerada pelo modelo $k - \omega$ SST. A interação química-turbulenta é representada pelo modelo *Eddy Dissipation Concept* (EDC) (MAGNUSSEN, 1981).

As reações químicas que ocorrem na fase gasosa são a combustão do *p*-xileno e do metano, representadas por reações de combustão de uma etapa. As taxas de reação seguem a lei de Arrhenius. A energia de ativação (E), o fator

pré-exponencial (A), coeficientes estequiométricos e ordem de reação são dispostos na Tabela 1 a seguir.

Tabela 1. Reações químicas e parâmetros de taxa de reação.

Reação	Espécie	Coefficiente	Ordem
Combustão de <i>p</i> -xileno $E = 8,3 \cdot 10^7$ J/kmol $A = 8,9 \cdot 10^8$ s ⁻¹	C ₈ H ₁₀	1	-0,1
	O ₂	10,5	1,85
	CO ₂	8	0
	H ₂ O	5	0
Combustão do Metano $E = 1,2 \cdot 10^8$ J/kmol $A = 8,3 \cdot 10^5$ s ⁻¹	CH ₄	1	-0,3
	O ₂	2	1,3
	CO ₂	1	0
	H ₂ O	2	0

Fonte: (Gröhn et al., 2014).

Os dados termodinâmicos das espécies químicas encontram-se disponíveis no *database* do Fluent 19.2 com exceção do *p*-xileno, que teve suas propriedades calculadas pelos coeficientes ajustados nos livros de Yaws (Yaws, 2014, 2015).

Fase líquida (discreta): A injeção das gotículas líquidas (fase discreta) segue uma distri-

buição de tamanhos de gota do tipo *Rosin-Rammler-Sperling-Bennet* (RRSB) e o modelo *Discrete Random Walk* (DRW) é utilizado para prever a dispersão turbulenta das gotículas no domínio computacional (Gosman & Ioannides, 2012).

Na Tabela 2 são dispostos os parâmetros utilizados para modelar a distribuição RRSB das gotas de combustível injetadas no reator. A vazão mássica da injeção de *p*-xileno é de $7,15 \cdot 10^{-5}$ kg/s (5 mL/min).

Tabela 2. Parâmetros do spray de *p*-xileno.

Parâmetro [unidades]	Valor
Temperatura [K]	300,0
Velocidade [m/s]	1,0
Número de Diâmetros [-]	50
Diâmetro Mínimo [m]	$7,19 \cdot 10^{-6}$
Diâmetro Máximo [m]	$3,6 \cdot 10^{-5}$
Diâmetro Médio [m]	$1 \cdot 10^{-5}$
Fator de Espalhamento [-]	1,5

Fonte: (Jünger, 2016).

Fase sólida: Como os mecanismos de formação de fuligem e negro de fumo são os mesmos – nucleação, crescimento superficial, aglomeração, coalescência, e oxidação – a modelagem matemática de geração de fuligem e negro de fumo pode ser aproximada. A teoria de síntese de hidrocarbonetos policíclicos aromáticos desenvolvidos na formação de fuligem foram adaptados para a síntese do negro de fumo em alguns trabalhos na literatura, obtendo boa concordância com dados experimentais (Nadimpalli et al., 2011; Naseri & Thomson, 2019; Skillas et al., 2005; Surovikin et al., 1976). Assim como em Bastiani *et al.* (2022), buscamos

modelar a formação do negro de fumo a partir desta hipótese, utilizando um tratamento matemático originalmente desenvolvido para modelar a geração de fuligem em processos de combustão.

Desta forma, o modelo de Boulanger *et al.* (2007) é implementado no *software* ANSYS Fluent 19.2 por meio de funções definidas pelo usuário (*User Defined Functions* – UDFs). Os autores adaptaram e trouxeram mais complexidade teórica e matemática no modelo apresentado em Tesner *et al.* (1971), buscando conectar o consumo de combustível com o crescimento superficial das partículas. Além disso, é inserida uma equação de transporte adicional para a densidade numérica de partículas (N). No modelo são desenvolvidas três equações que definem a formação de negro de fumo no processo de combustão.

A Equação (1) refere-se ao transporte de núcleos radicais, intermediários da formação de fração mássica (Equação (2)) e densidade numérica de partículas (Equação (3)). Os termos do lado direito das equações representam o termo fonte de cada escalar. Na Equação (1), o primeiro termo do lado direito refere-se à formação espontânea de núcleos radicais, o segundo à ramificação de núcleos, o terceiro a terminação ou destruição de radicais na superfície de partículas (N) formadas e o último a oxidação de núcleos. Ao lado direito da Equação (2) encontram-se os termos de crescimento superficial, nucleação de partículas e oxidação do negro de fumo, respectivamente. Por fim, na Equação (3) os termos do lado direito representam a formação, terminação e coalescência das partículas formadas de negro de fumo, respectivamente. A oxidação do material (S_{ox}) é descrita segundo o modelo de Nagle e Strickland-Constable (1962), e a oxidação de núcleos – S'_{ox} – por Magnussen et al. (1977), modificada por Chan et al. (1997).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho n^*) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} n^*) - \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla n^* \right) = a_0^* \rho_F e^{\left(\frac{-T_a}{T} \right)} + (f - g) C_{n^*} - g_0 C_n^* C_{N^*} - S'_{ox} \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_s) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_s) - \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla Y_s \right) = K_{G,nuc} C_F C_N + C_a a C_n - C_N A_s S_{ox} \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho N^*) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} N^*) - \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla N^* \right) = a C_{n^*} - b C_{N^*} C_{n^*} - K_c \sqrt{T} \left(\frac{\rho Y_s}{\rho_s} \right)^{\frac{1}{6}} C_{N^*}^{\frac{11}{6}} \quad (3)$$

RESULTADOS E DISCUSSÃO

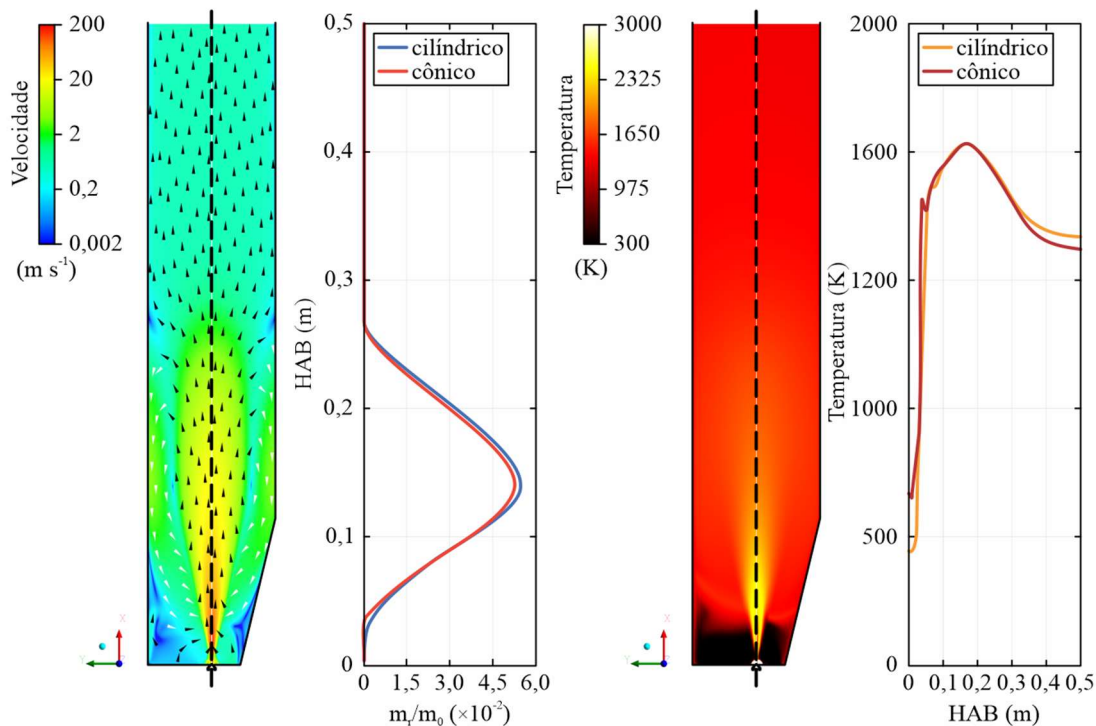
Na Figura 2, são apresentados os resultados referentes velocidade para os casos estudados junto a um gráfico de taxa de recirculação média traçado em relação à altura acima do queimador (*Height Above Burner – HAB*). Nos contornos, as setas pretas indicam velocidades ascendentes e as setas brancas, velocidades descendentes, com intuito de facilitar a visualização de regiões onde há recirculação. Observa-se uma diferença sutil nos perfis de velocidade, em que o reator cônico apresenta velocidades ligeiramente maiores onde ocorre recirculação de gás. Como observado em Buss *et al.* (2020), Ricou e Spalding (1961) e Waser *et al.* (2017), a recirculação em reatores fechados é um fenômeno comum no estudo de jatos injetados em meios estagnados.

Um fluido injetado em ar estagnado e pressão uniforme desenvolve um jato livre que se espalha pelo ambiente. Devido aos gradientes de velocidade, tensão cisalhante é gerada em camadas de fluido em torno do jato, criando turbilhões que aumentam o arraste do gás ao redor.

Desta maneira, gás é levado junto ao jato livre, gerando regiões de recirculação (Ricou & Spalding, 1961). Fisicamente, a diferença de momento entre o jato e o gás de *co-flow* causa recirculação de gás. A quantidade de movimento do jato é dissipada pelo gás de *co-flow* se este possuir momento suficiente. Caso contrário, a formação de vórtices ocorre e gás recircula dentro do reator. Para o caso em estudo foram observadas tais regiões, que podem ser eliminadas aumentando-se a vazão de ar de *co-flow* (Buss *et al.*, 2020). A taxa de recirculação do reator cilíndrico é ligeiramente superior que do reator cônico, este resultado sugere que a diferença de diâmetro do prato poroso na geometria cônica (entrada do gás de *co-flow*), aumenta a velocidade do gás, alterando o perfil do escoamento entre os reatores.

Na mesma figura são apresentados os contornos de temperatura junto a temperatura média traçada na altura do reator. Novamente verificam-se diferenças sutis entre os perfis, entretanto o reator cilíndrico possui maior temperatura média no topo do reator ($HAB > 0,3$ m).

Figura 2. Contornos de velocidade e taxa de recirculação mássica (esquerda) e contornos de temperatura e temperatura média ao longo do eixo axial (direita).



Na Figura 3 são apresentados os resultados referentes à concentração numérica de núcleos radicais e fração mássica de negro de fumo, descritas pelo modelo apresentado na seção anterior. De acordo com o modelo, a geração de núcleos radicais é sensível à temperatura, concentração de combustível e à própria concentração de núcleos. Observando os contornos e o gráfico referente à quantidade de núcleos radicais formados, é fato que existem maiores concentrações no reator de geometria cilíndrica. Como no reator cilíndrico observou-se uma taxa de recirculação levemente superior, isto indica que as quantidades formadas passam mais tempo no reator e na chama. Deste modo, existe uma retenção maior de núcleos no reator cilíndrico, que se multiplicam rapidamente pelo termo de ramificação em cadeia descrito pelo modelo, aumentando a concentração de núcleos presente. Tal resultado mostra a sensibilidade da formação de núcleos devido ao termo de ramificação.

Apesar de a temperatura média do reator cilíndrico ser superior em alturas acima de 0,3 m, a maior taxa de formação de núcleos ocorre na região da chama ($\sim 0,2$ m) e decresce

rapidamente após ela. Portanto a concentração de núcleos radicais não é afetada somente pelo perfil de temperatura.

Na mesma figura são apresentados os contornos referentes a fração mássica de negro de fumo. Como a formação de núcleos radicais no reator cilíndrico é superior, a formação de negro de fumo é favorecida, apresentando maiores quantidades formadas para esta geometria.

Por fim, na Figura 4, são apresentados os contornos de diâmetro médio de partículas junto ao gráfico de diâmetros médios ao longo da altura do reator. No início do reator ocorre o surgimento das primeiras partículas, e é observado um ligeiro crescimento delas até a altura próxima a 0,1 m. Nesta região o reator atinge altas temperaturas, favorecendo a geração de uma grande quantidade de partículas, o que causa uma redução no valor do diâmetro médio. É assumido que o diâmetro das primeiras partículas formadas é de 1 nm (Boulanger et al., 2007). Em regiões acima de 0,25 m o diâmetro médio aumenta, devido aos processos de crescimento superficial e coalescência de partículas.

Figura 3. Contornos de concentração de núcleos radicais (esquerda), fração mássica (direita) e médias traçadas ao longo do eixo axial do reator.

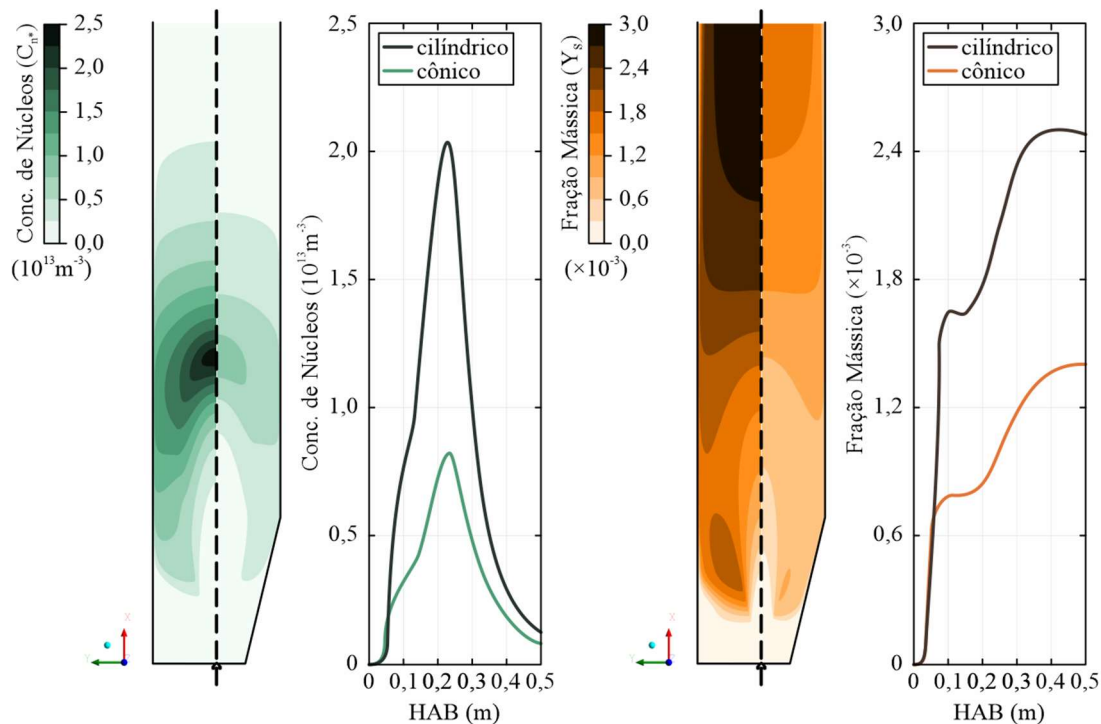
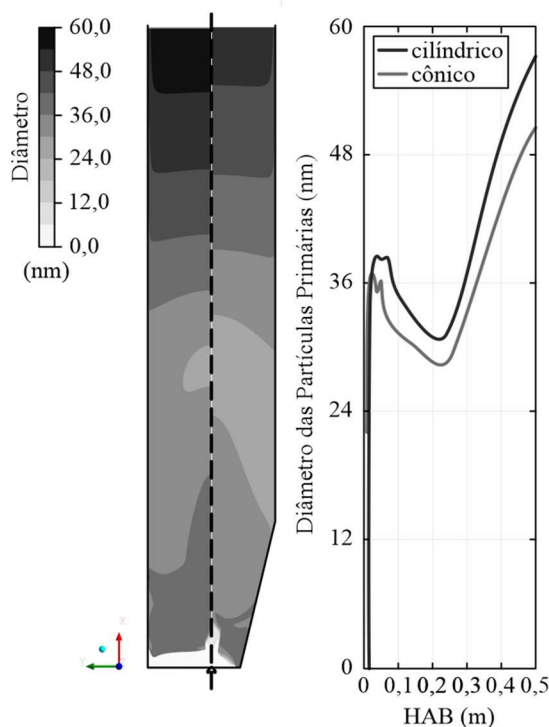


Figura 4. Contornos e média na altura do diâmetro das partículas de negro de fumo.



É interessante observar que as partículas de negro de fumo formadas no reator cilíndrico (~ 58 nm) possuem tamanho próximo àquelas formadas no reator de geometria cônica (~ 50 nm), apesar da diferença no perfil de fração mássica gerado (Y_s). Portanto, tamanho de partícula não é tão sensível às quantidades formadas, mas sim às condições de operação do reator FSP.

CONCLUSÃO

Neste trabalho foi estudada a formação de negro de fumo em um reator de pirólise em *spray* flamejante com diferentes geometrias. A análise dos perfis de velocidade mostra leve diferença no escoamento entre os casos estudados. Para o reator cônico a velocidade na região de recirculação é ligeiramente maior e, conseqüentemente, também a taxa de recirculação de gás. Reactores com maior taxa de recirculação acabam produzindo maiores quantidades de negro de fumo. A população de núcleos radicais sofre um processo de ramificação – semelhante ao processo de reações em cadeia – sendo ela proporcional às quantidades presentes no domínio computacional. Portanto, quanto maior o tempo de residência das partículas no reator,

maior será a taxa de ramificação de núcleos radicais e conseqüentemente a formação de negro de fumo aumenta.

A análise de tamanho de partículas revela que apesar de existir uma diferença considerável na quantidade de negro de fumo formada entre os casos, o tamanho de partícula não é tão afetado. Esta análise sugere que o tamanho das partículas de negro de fumo no reator FSP não é sensível às quantidades formadas, mas sim as condições operacionais impostas no processo. Nas regiões onde há alta taxa de formação de partículas (centro da chama) o tamanho médio acaba diminuindo, contudo, volta a crescer devido aos mecanismos de crescimento superficial e coalescência de partículas. No topo do reator, as partículas possuem tamanhos de aproximadamente 58 nm para o reator cilíndrico e 50 nm para o reator cônico.

NOMENCLATURA

Y_s – Fração mássica de negro de fumo ($\text{kg}_s / \text{kg}_{\text{gas}}$)

n^* – Concentração normalizada de núcleos radicais ($\text{part. } 10^{15} / \text{kg}$)

N^* – Concentração normalizada de partículas de negro de fumo ($\text{part. } 10^{15} / \text{kg}$)

ρ – Densidade local do gás (kg/m^3)
 μ_t – Viscosidade turbulenta local (m^2/s)
 σ_t – Número de Prandtl turbulento (-)
 a_0^* – Constante de formação de núcleos
 (part. $10^{15}/(\text{kg} \cdot \text{s})$)
 ρ_F – Concentração mássica de combustível
 (kg/m^3)
 T_a – Temperatura de ativação da formação espontânea de núcleos radicais (K)
 $(f - g)$ – Constante de ramificação e terminação de núcleos radicais (s^{-1})
 C_{n^*} – Concentração normalizada de núcleos radicais por m^3 (part. $10^{15}/\text{m}^3$)
 C_{N^*} – Concentração normalizada numérica de partículas (part. $10^{15}/\text{m}^3$)
 g_0 – Coeficiente de terminação de partículas ($\text{m}^3/(\text{part. } 10^{15} \cdot \text{s})$)
 S'_{ox} – Oxidação de núcleos radicais (part. $10^{15}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$)
 $K_{G,\text{nuc}}$ – Constante de crescimento superficial ($\text{kg} \cdot \text{m}^3/(\text{kmol} \cdot \text{s})$)
 C_F – Concentração molar de combustível (kmol/m^3)
 C_N – Concentração numérica de partículas (part./ m^3)
 C_a – Massa da partícula formada ($\text{kg}/\text{part.}$)
 a – Constante de formação de partículas (s^{-1})
 C_n – Concentração de núcleos radicais (part./ m^3)
 A_s – Área superficial de uma partícula (m^2)
 S_{ox} – Oxidação de partículas de negro de fumo ($\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{part} \cdot \text{s})$)
 b – Constante de terminação de partículas ($\text{m}^3/(\text{part. } 10^{15} \cdot \text{s})$)
 K_c – Constante de coagulação de partículas ($\text{m}^{2,5}/(\text{K}^{0,5} \cdot \text{s} \cdot (\text{part. } 10^{15})^{0,83})$)
 ρ_s – Densidade da partícula de negro de fumo (kg/m^3)

AGRADECIMENTOS

Esta pesquisa recebeu auxílio financeiro da Fundação de Amparo à Pesquisa de São Paulo – FAPESP (Projeto ID. 2020/08502-9 e 2021/01067-8), Brasil. Agradecimentos adicionais a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – CAPES (Projeto ID: BEX 12369/12-8 e 88881.627991/2021-01).

REFERÊNCIAS

- Bastiani, F. H., Neto, P. B., Buss, L., Fritsching, U., & Noriler, D. (2022). Modeling the Carbon Black Production in Enclosed FSP Reactor. *Journal of Fluid Flow, Heat and Mass Transfer*.
<https://doi.org/10.11159/jffhmt.2022.008>
- Bianchi Neto, P., Meierhofer, F., Meier, H. F., Fritsching, U., & Noriler, D. (2020). Modelling polydisperse nanoparticle size distributions as produced via flame spray pyrolysis. *Powder Technology*, 370, 116–128. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2020.05.019>
- Boulanger, J., Liu, F., Neill, W. S., & Smallwood, G. J. (2007). An improved soot formation model for 3D diesel engine simulations. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 129(3), 877–894. <https://doi.org/10.1115/1.2718234>
- Buss, L., Noriler, D., & Fritsching, U. (2020). Impact of Reaction Chamber Geometry on the Particle-Residence-Time in Flame Spray Process. *Flow, Turbulence and Combustion*, 105(4), 1055–1086. <https://doi.org/10.1007/s10494-020-00187-1>
- Chan, M., Das, S., & Reitz, R. D. (1997, October 1). *Modeling Multiple Injection and EGR Effects on Diesel Engine Emissions*. <https://doi.org/10.4271/972864>
- Donnet, J. B., Bansal, R. C., & Wang, M.-J. (1993). *Carbon Black: Science and Technology* (2nd ed.). Marcel Dekker.
- Gosman, A. D., & Ioannides, E. (2012). Aspects of Computer Simulation of Liquid-Fueled Combustors. <https://doi.org/10.2514/3.62687>, 7(6), 482–490. <https://doi.org/10.2514/3.62687>
- Gröhn, A. J., Pratsinis, S. E., Sánchez-Ferrer, A., Mezzenga, R., & Wegner, K. (2014). Scale-up of nanoparticle synthesis by flame spray pyrolysis: The high-temperature particle residence time. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 53(26), 10734–10742. <https://doi.org/10.1021/ie501709s>
- Jiang, G., Guo, J., Sun, Y., Liu, X., & Pan, J. (2021). Pyrolytic carbon black-derived porous carbon with spherical skeleton as

- recovered and enduring electrode material for supercapacitor. *Journal of Energy Storage*, 44, 103372.
<https://doi.org/10.1016/J.EST.2021.103372>
- Jüngst, N. (2016). *Relatório Final de Atividades*. FURB.
- MAGNUSSEN, B. (1981, January 12). On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow. *19th Aerospace Sciences Meeting*.
<https://doi.org/10.2514/6.1981-42>
- Magnussen, B. F., & Hjertager, B. H. (1977). On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 16(1), 719–729. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(77\)80366-4](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(77)80366-4)
- Meierhofer, F., Mädler, L., & Fritsching, U. (2020). Nanoparticle evolution in flame spray pyrolysis—Process design via experimental and computational analysis. *AIChE Journal*, 66(2), 1–14.
<https://doi.org/10.1002/aic.16885>
- Nadimpalli, N. K. V., Buddhiraju, V. S., & Runkana, V. (2011). Modeling and simulation of carbon black synthesis in an aerosol flame reactor. *Advanced Powder Technology*, 22(1), 141–149.
<https://doi.org/10.1016/J.APT.2010.12.015>
- NAGLE, J., & STRICKLAND-CONSTABLE, R. F. (1962). Oxidation of Carbon Between 1000–2000°C. *Proceedings of the Fifth Conference on Carbon*, 348(1958), 154–164. <https://doi.org/10.1016/b978-0-08-009707-7.50026-1>
- Naseri, A., & Thomson, M. J. (2019). Development of a numerical model to simulate carbon black synthesis and predict the aggregate structure in flow reactors. *Combustion and Flame*, 207, 314–326.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.06.001>
- Noriler, D., Rosebrock, C. D., Mädler, L., Meier, H. F., & Fritsching, U. (2014). Influence of atomization and spray parameters on the flame spray process for nanoparticle production. *Atomization and Sprays*, 24(6), 495–524.
<https://doi.org/10.1615/AtomizSpr.2014008559>
- Ricou, F. P., & Spalding, D. B. (1961). Measurements of entrainment by axisymmetrical turbulent jets. *Journal of Fluid Mechanics*, 11(1), 21–32.
<https://doi.org/10.1017/S0022112061000834>
- Sebok, E. B., & Taylor, R. L. (2001). Carbon Blacks. In *Encyclopedia of Materials: Science and Technology* (Vol. 24, Issue 6, pp. 902–906). Elsevier.
<https://doi.org/10.1016/B0-08-043152-6/00173-X>
- Skillas, G., Becker, C., Mühlenweg, H., & Behnisch, J. (2005). Simulation of particulates in a carbon black reactor. *Journal of Nanoparticle Research*, 7(1), 15–27.
<https://doi.org/10.1007/s11051-004-5746-5>
- Surovikin, V. F., Rogov, A. v., & Vershinin, L. v. (1976). Carbon black formation in the in complete combustion of benzene. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 11(2), 202–209.
<https://doi.org/10.1007/BF00756719>
- Tesner, P. A., Smegiriova, T. D., & Knorre, V. G. (1971). Kinetics of dispersed carbon formation. *Combustion and Flame*, 17(2), 253–260. [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(71\)80168-2](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(71)80168-2)
- Waser, O., Brenner, O., Groehn, A. J., & Pratsinis, S. E. (2017). Process design for size-controlled flame spray synthesis of LI4TI5O12 and electrochemical performance. *Chemical and Process Engineering - Inzynieria Chemiczna i Procesowa*, 38(1), 51–66. <https://doi.org/10.1515/cpe-2017-0005>
- Watson, A. Y., & Valberg, P. A. (2001). Carbon black and soot: Two different substances. *American Industrial Hygiene Association Journal*, 62(2), 218–228.
<https://doi.org/10.1080/15298660108984625>
- Yaws, C. L. (2014). *Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons* (2nd ed.). Elsevier. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780815515968500274>
- Yaws, C. L. (2015). The Yaws Handbook of Physical Properties for Hydrocarbons and

Chemicals. In *The Yaws Handbook of Physical Properties for Hydrocarbons and Chemicals* (2nd ed.). Elsevier.
<https://doi.org/10.1016/C2013-0-18972-6>