

Comparative Analysis of Droplet Evaporation Models: Physical Simplifications and Approximation Approaches

Mildred Herrera ¹, Carlos Renaudo^{1,2}, Diego Bertin ^{1,2}

¹ PLAPIQUI-CONICET/UNS, Bahía Blanca, Argentina

² Departamento de Ingeniería Química, UNS, Bahía Blanca, Argentina
mherrera@plapiqui.edu.ar

Abstract. Droplet evaporation is a fundamental phenomenon in multiphase dispersed-phase systems, governing mass and energy transfer between phases in applications such as spray combustion, atomization, and agricultural spraying. Rigorous evaporation models, while physically accurate, impose significant computational costs when integrated as submodels in large-scale Lagrangian spray simulations. This work presents a systematic numerical comparison of a rigorous evaporation model based on the Abramzon–Sirignano formulation with an internal radial temperature profile, against three physically simplified models and three approximation models. The simplified models includes assumptions regarding the Stefan flow, the internal temperature profile, and thermal equilibrium. The approximation models replace the iterative formulation with explicit algebraic expressions calibrated against over 6,000 rigorous simulations spanning a five-dimensional parametric space. Model performance was evaluated in terms of mean absolute percentage error and computational cost, expressed in wall time and Computational Work Units. Results show that the Uniform Profile model achieves errors below 0.6% with a 10 speedup, while the Thermal Equilibrium model reaches approximately a 130 speedup with similar accuracy. Among approximation models, Aproximado-2 offers the best trade-off, achieving a MAPE of ~6% with over 600 speedup and a reduction of nearly two orders of magnitude in computational work. These findings provide practical guidance for selecting evaporation models in multiphysics simulations where computational efficiency is critical.

Keywords: droplet evaporation, approximated models, Abramzon–Sirignano.

Análisis Comparativo de Modelos de Evaporación de Gotas: Simplificaciones Físicas y Modelos Aproximados

Resumen. La evaporación de gotas es un fenómeno fundamental en sistemas multifásicos con fase dispersa, que gobierna la transferencia de masa y energía entre fases en aplicaciones como la combustión de sprays, la atomización y la pulverización agrícola. Los modelos rigurosos de evaporación, aunque físicamente precisos, imponen costos computacionales significativos cuando se integran como submodelos en simulaciones Lagrangianas de sprays a gran escala. En este trabajo se presenta una comparación numérica sistemática de un modelo

riguroso de evaporación basado en la formulación de Abramzon–Sirignano con perfil radial de temperatura interno, frente a tres modelos con simplificaciones físicas y tres modelos aproximados. Los modelos simplificados incluyen hipótesis sobre el flujo de Stefan, el perfil de temperatura interno y el equilibrio térmico. Los modelos aproximados reemplazan la formulación iterativa por expresiones algebraicas explícitas calibradas a partir de más de 6.000 simulaciones rigurosas en un espacio paramétrico de cinco dimensiones. El desempeño de los modelos se evaluó en términos del error absoluto porcentual medio y el costo computacional, expresado en tiempo de pared y Unidades de Trabajo Computacional. Los resultados muestran que el modelo de Perfil Uniforme alcanza errores inferiores al 0,6% reduciendo el tiempo de cálculo 10 veces, mientras que el modelo de Equilibrio Térmico logra aproximadamente un tiempo de cálculo 130 más rápido que el modelo riguroso con precisión similar. Entre los modelos aproximados, Aproximado-2 ofrece el mejor compromiso, con un MAPE de ~6% y una aceleración superior a 600 veces, reduciendo el trabajo computacional en casi dos órdenes de magnitud.

Palabras clave: evaporación de gotas, modelos aproximados, Abramzon-Sirignano.

1 Introducción

Los sistemas multifásicos con fase dispersa son claves para entender procesos de diversas áreas tales como las de combustibles, agrícolas, ambientales, entre otras (Crowe et al., 2012; Zhou et al. 2017). El estudio de los flujos multifásicos con fase dispersa ha evolucionado significativamente en las últimas décadas, particularmente en aplicaciones vinculadas a combustión, procesos de atomización y comportamiento de aerosoles en medios turbulentos (Sazhin, 2006). En estos sistemas, la evaporación de las gotas constituye un fenómeno fundamental que gobierna la transferencia de masa y energía entre la fase dispersa y la fase continua (Aggarwal & Peng, 1995). Dependiendo el proceso estudiado puede condicionar variables clave como la distribución de tamaños al depositarse en áreas objetivos, el tiempo de residencia y la eficiencia global del proceso (Abramzon & Sirignano, 1989; Sazhin, 2006). Por ejemplo, en aplicaciones agrícolas la combinación de los efectos de evaporación y transporte de las gotas determinan directamente la deriva de pulverización, un fenómeno crítico por sus implicancias ambientales y sanitarias (Renaudo et al., 2022).

Desde el punto de vista del modelado, la evaporación de gotas ha sido abordada mediante enfoques que difieren en complejidad y fidelidad física. Diversos autores han propuesto modelos empíricos puros, en los cuales la tasa de evaporación o el tiempo de vida de la gota se expresan directamente mediante correlaciones ajustadas a datos experimentales, típicamente en función de números adimensionales como Reynolds, Sherwood y Schmidt, o variables operativas como temperatura y presión (Ranz & Marshall, 1952; Sazhin, 2006; Zhou et al., 2017). Estos modelos, aunque carecen de una base fenomenológica explícita, han demostrado en numerosos casos una capacidad predictiva comparable —e incluso superior en ciertos regímenes— a modelos teóricos simplificados, particularmente cuando se calibran para condiciones específicas de operación. No obstante, su aplicabilidad suele estar limitada al rango de condiciones para el cual fueron ajustados, lo que restringe su capacidad de extrapolación y su

integración en marcos multifísicos más generales (Aggarwal & Peng, 1995; Sazhin, 2006).

En su forma más simplificada, los modelos clásicos se basan en la ley D^2 , derivada de soluciones difusivas cuasi-estacionarias bajo hipótesis de equilibrio local. Sin embargo, estas formulaciones resultan insuficientes en presencia de convección o gradientes térmicos significativos (Abramzon & Sirignano, 1989; Finneran et al., 2022). Dichas limitaciones motivaron el desarrollo de modelos semiempíricos que incorporan efectos convectivos mediante correlaciones tipo Ranz–Marshall y la influencia del flujo de Stefan a través de números de Spalding, siendo el modelo de Abramzon–Sirignano uno de los más utilizados en aplicaciones de ingeniería (Abramzon & Sirignano, 1989; Aggarwal & Peng, 1995; Both et al., 2022). A su vez, otro fenómeno directamente relacionado con la evaporación es el perfil de temperatura interno de la gota sujeta a evaporación. Los modelos más simples asumen conductividad térmica infinita, lo que conduce a un perfil de temperatura uniforme (Aggarwal & Peng, 1995; Sazhin, 2006). Esta hipótesis es válida cuando la escala temporal de la difusión térmica es varios órdenes de magnitud menor a la de evaporación. Para los casos donde esto no se cumple, se han propuesto modelos con perfiles espaciales no uniformes (Sazhin, 2006). Dombrovsky & Sazhin (2003) propusieron aproximar el perfil de temperatura a una parábola que permite capturar gradientes radiales de temperatura sin resolver explícitamente la ecuación de conducción en la fase líquida. Siguiendo el mismo enfoque, Zhou et al. (2017) desarrollaron un modelo con perfil polinómico de tercer orden para la temperatura dentro de la gota, acoplado a una descripción del flujo interno tipo vórtice de Hill. Los autores reportaron que esto permite representar de manera más realista la redistribución de calor inducida por la circulación interna y capturar estructuras no monótonas del campo térmico. Estos modelos constituyen un compromiso entre fidelidad física y costo computacional, ya que evitan la resolución completa del problema tridimensional en la fase líquida, aunque su validez depende del régimen de flujo interno y de las condiciones de operación (Sazhin, 2006). Existen también modelos que resuelven la evaporación de una gota a escala microscópica, incorporando la dinámica interfacial mediante técnicas como Volume of Fluid (VOF), front-tracking o simulaciones numéricas directas (DNS) (Irfan & Muradoglu, 2017; Dodd et al., 2021; Shao et al., 2022). Esto permite capturar efectos complejos como deformación de la gota, interacción con turbulencia y condiciones dinámicas en la interfase.

El número de evaluaciones aumenta cuando los modelos de evaporación se integran como submodelos en simulaciones de sprays, donde es necesario evaluar el comportamiento de un gran número de gotas bajo condiciones locales altamente variables (Sirignano, 1999; Xia et al., 2025). En estos contextos, los modelos Lagrangianos acoplados a campos Eulerianos, así como las formulaciones basadas en ecuaciones de balance poblacional, requieren la evaluación repetida de modelos de evaporación bajo condiciones no estacionarias y dependientes del flujo (Feng et al., 2023; Xia et al., 2025). Como resultado, modelar la evaporación puede convertirse en uno de los principales cuellos de botella computacionales, especialmente cuando se busca mantener coherencia con la física subyacente y capturar adecuadamente la interacción entre transporte convectivo, difusión y fenómenos interfaciales (Agarwal et al., 2019; Both et al., 2022). Debido a la complejidad numérica, los modelos que

resuelven a escala microscópica la evaporación no son considerados en estos casos ya que resolver los mismos sería restrictivo computacionalmente.

En este contexto, resulta de especial interés analizar qué hipótesis pueden adoptarse para desarrollar modelos con física simplificada que generen un bajo error relativo y una elevada reducción en el tiempo de cómputo. A su vez, comparar la eficiencia computacional de dichos modelos con modelos aproximados, los cuales buscan reemplazar formulaciones iterativas de alta fidelidad por expresiones explícitas o aproximaciones basadas en datos preservando la consistencia con el fenómeno físico, pero con costos computacionales significativamente menores. En este trabajo se presenta la comparación numérica y en tiempo de resultados de simulaciones de un modelo riguroso y de modelos con simplificaciones sobre la física de la evaporación de gotas y modelos aproximados.

2 Modelos matemáticos

2.1 Riguroso - modelo de referencia

Se desarrollo en Python, utilizando las librerías Numpy y Scipy, un modelo de evaporación de una gota, basado en la formulación de Abramzon & Sirignano (1989) que incluye además un perfil radial de temperatura interno de la gota basado en el modelo de Zhou et al. (2017). Este modelo se consideró como modelo de referencia para comparar el resto de los modelos. Las variables se evaluaron todas en unidades del sistema internacional.

Sistema de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO).

El estado de la gota se describe mediante su masa (m) y su temperatura media ponderada ($\bar{T}_l$). El sistema evoluciona según:

$$\frac{dm}{dt} = -m_v \quad (1)$$

$$\frac{d\bar{T}_l}{dt} = \frac{Q_{conv} - m_v L_v}{m \cdot c_{pl}} \quad (2)$$

donde m_v es el caudal másico evaporado, L_v es el calor latente de vaporización evaluado a la temperatura de superficie de la gota (T_s), y Q_{conv} es el flujo de calor convectivo desde el gas hacia la superficie de la gota y c_{pl} es el calor específico del líquido.

Para resolver las ecuaciones diferenciales se utilizó el solver LSODA debido a que reduce considerablemente la cantidad de iteraciones en casos de evaporación muy lenta donde la derivada en el tiempo de la masa de la gota es muy baja. La tolerancia relativa utilizada 10^{-8} , mientras que la absoluta fue 10^{-12} .

Ecuaciones algebraicas.

Es el caudal másico evaporado se calcula como:

$$m_v = \pi d \rho_g D_{ab} Sh^* \ln(1 + B_M) \quad (3)$$

donde d es el diámetro de la gota, ρ_g es la densidad gas, D_{ab} es la difusividad binaria, Sh^* es el número de Sherwood corregido y B_M , es el número de Spalding para transferencia de masa.

El flujo de calor convectivo (Q_{conv}) se calcula como:

$$Q_{conv} = \pi d k_g Nu^* (T_\infty - T_s) \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \quad (4)$$

donde k_g es la conductividad del gas, Nu^* es el número de Nusselt corregido y B_T es el número de Spalding para transferencia de calor.

Para obtener Sh^* y Nu^* es necesario calcular primero los números de Sherwood (Sh_0) y Nusselt (Nu_0) sin corrección. Los mismos se pueden calcular mediante la correlación de Ranz-Marshall:

$$Nu_0 = 2 + 0.552 Re^{1/2} Pr^{1/3}$$

$$Sh_0 = 2 + 0.552 Re^{1/2} Sc^{1/3}$$

donde Re , Pr y Sc son los números de Reynolds, Prandtl y Schmidt, respectivamente.

$$Re = \frac{\rho_g |U| d}{\mu_g}$$

donde $|U|$ es la velocidad relativa entre la gota y el aire y es una variable de entrada al modelo.

$$Pr = \frac{\mu_g c_{pg}}{k_g}$$

donde μ_g y c_{pg} son la viscosidad y la capacidad calorífica del aire, respectivamente.

$$Sc = \frac{\mu_g}{\rho_g D_{ab}}$$

B_M esta correlacionado a la fuerza impulsora de transferencia de masa y se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$B_M = \frac{Y_s - Y_\infty}{1 - Y_s}$$

donde Y_s es la fracción másica de vapor en la superficie de la gota e Y_∞ es la fracción másica de vapor de agua en el aire que rodea la gota.

Asumiendo saturación en la superficie de la gota:

$$Y_s = \frac{X_s \cdot M_v}{X_s \cdot M_v + (1 - X_s) \cdot M_g}$$

donde X_s es la fracción molar de agua en la superficie de la gota y M_v y M_g son los pesos moleculares del vapor de agua y del aire. X_s se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$X_s = \frac{P_{sat}(T_s)}{P_{atm}}$$

donde $P_{sat}(T_s)$ es la presión de saturación del agua a la temperatura de la superficie de la gota y P_{atm} la presión atmosférica del aire que rodea la gota. De forma similar a Y_s , Y_∞ se calcula de la siguiente manera:

$$Y_\infty = \frac{X_\infty \cdot M_v}{X_\infty \cdot M_v + (1 - X_\infty) \cdot M_g}$$

donde X_∞ es la fracción molar de agua en el seno del aire.

$$X_\infty = \frac{(HR \cdot P_{sat}(T_\infty))}{P_{atm}}$$

siendo HR la humedad relativa, expresada en fracción, del ambiente.

Para incluir el flujo de Stefan tanto en el balance de masa como el de energía se usa el siguiente factor de corrección:

$$F(B) = (1 + B)^{0.7} \frac{\ln(1 + B)}{B}$$

donde B será B_M o B_T dependiendo si se incluye el efecto en la transferencia de masa o en la de energía. Sh^* y Nu^* se calculan como:

$$Sh^* = 2 + \frac{Sh_0 - 2}{F(B_M)}$$

$$Nu^* = 2 + \frac{Nu_0 - 2}{F(B_T)}$$

B_T esta correlacionado a la fuerza impulsora de transferencia de calor, el cual se calcula como:

$$B_T = (1 + B_M)^\phi - 1$$

ϕ es una correlación que permite acoplar la transferencia de calor y masa:

$$\phi = \frac{c_{pv} Sh^* Pr}{c_{pg} Nu^* Sc}$$

donde c_{pv} es la capacidad calorífica del vapor de agua. Este sistema debe resolverse de forma iterativa ya que Nu^* , B_T y ϕ generan una ecuación implícita. Para calcular T_s es necesario resolver el balance de energía en la interfase gas-líquido:

$$Q_{conv} = m_v L_v + Q_l \quad (5)$$

donde Q_l es el flujo de calor que penetra hacia el núcleo de la gota.

Siguiendo el procedimiento de Zhou et al. (2017), el modelo asume un perfil parabólico de temperatura dentro de la gota (admite también perfil uniforme y cúbico). Esta suposición permite correlacionar la T_s con $\bar{T}_l$ en la ecuación de Q_l .

$$Q_l = b_q \cdot \pi R (\chi_l k_l) (T_s - \bar{T}_l) \quad (6)$$

donde b_q es un coeficiente de transferencia interna que depende del perfil, k_l es la conductividad del agua y χ_l es un factor de corrección de la conductividad interna de la gota debido a la fricción gaseosa que induce circulación interna (vórtice de Hill) y acelera la transferencia de calor.

χ_l se calcula iterativamente en función del número de Peclet líquido (Pe_l)

$$Pe_l = \frac{U_s d}{\alpha_l}$$

donde α_l es la difusividad térmica del líquido y U_s es la velocidad de la superficie del vórtice inducida por el gas.

$$\alpha_l = \frac{k_l}{(\rho_l c_{pl})}$$

donde c_{pl} es el calor específico del líquido.

$$U_s = \frac{\rho_g C_F |U| d}{32 \mu_l}$$

Siendo μ_l la viscosidad del líquido y C_F el coeficiente de fricción corregido. Este último es igual a 0 para $Re \leq 10-3$, de lo contrario:

$$C_F = \frac{12.69 \cdot Re^{-1/3}}{1 + B_M}$$

Luego, el factor de corrección de la conductividad interna se calcula como:

$$\chi_l = 1.86 + 0.86 \tanh \left[2.245 \log_{10} \left(\frac{Pe_l}{30} \right) \right]$$

En cada iteración del solver utilizado para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales, es necesario resolver la raíz T_s del residuo:

$$\text{Residual}(T_s) = Q_{conv}(T_s) - m_v(T_s)L_v(T_s) - Q_l(T_s, T_l) = 0 \quad (7)$$

Propiedades de los fluidos.

A fin de asegurar la precisión del modelo, las propiedades deben evaluarse en la temperatura local correspondiente al fenómeno físico (gas, superficie o interior líquido). El modelo de Abramzon & Sirignano (1989) utiliza propiedades de la capa de interfase para parte de los cálculos de propiedades. Esta se define como:

$$T_{film} = \frac{T_s + T_\infty}{2} \quad (8)$$

En la Tabla 1 se detallan las temperaturas a las que debe evaluarse cada propiedad.

Tabla 1. Temperatura utilizada en el cálculo de propiedades.

Propiedad	Fase	Temperatura
ρ_g	Gas	T_{film}
μ_g	Gas	T_{film}
k_g	Gas	T_{film}
c_{pg}	Gas	T_{film}
c_{pv}	Gas	T_{film}
D_{ab}	Gas	T_{film}
P_{sat}	Interfase	T_s
L_v	Interfase	T_s
ρ_l	Líquido	$\bar{T}_l$
c_{pl}	Líquido	$\bar{T}_l$
k_l	Líquido	$\bar{T}_l$
μ_l	Líquido	$\bar{T}_l$

Este modelo presenta los siguientes posibles cuellos de botella en el cálculo:

1. Iteración de Brent: Búsqueda de raíces para T_s en cada llamada al solver.
2. Iteraciones intrínsecas del modelo de Abramzon & Sirignano (1989): Resolución del acoplamiento $B_T - Nu^*$ y cálculo de χ_l dentro de cada paso de Brent.
3. Propiedades variables: Recálculo constante de densidades, conductividades y difusividades.

2.2 Modelos con simplificaciones físicas

Se analizaron los resultados numéricos y el costo computacional de las simulaciones bajo distintas simplificaciones físicas. El primer modelo (No-Stefan) omite el flujo de Stefan, eliminando el cálculo iterativo asociado al acoplamiento $B_T - Nu^*$ y prescindiendo de los factores de corrección basados en los números de Spalding. El segundo modelo (Perfil Uniforme) asume un perfil radial de temperatura uniforme dentro de la gota, lo que evita la resolución de la temperatura superficial mediante el método de Brent. El tercer modelo (Equilibrio Térmico) considera que la gota se encuentra en equilibrio térmico a la temperatura de bulbo húmedo; en consecuencia, no se resuelve el balance de energía, asumiendo $\frac{dT_l}{dt} = 0$.

2.3 Modelos aproximados

Todos los modelos aproximados analizados en este trabajo comparten la misma ecuación diferencial que permite calcular el cambio de volumen respecto al tiempo (Ec. 9).

$$\frac{dV}{dt} = -C \cdot \sqrt{S} \cdot (T_\infty - T_{wb}) \quad (9)$$

La misma sigue la postulación de la Ley D², donde la velocidad de evaporación es proporcional a una fuerza impulsora ($T_\infty - T_{wb}$), al área superficial de la gota (S) y a una constante específica del modelo C . La relación entre el volumen de la gota y el área superficial de la misma depende de la geometría de la gota. Se utilizó el diámetro de sauter para asegurar la correlación para partículas no esféricas. El mismo se define como el diámetro de una esfera que tiene la misma relación volumen/superficie que la gota a analizar.

$$d_{sv} = 6 \frac{V}{S}$$

Se realizaron más de 6000 simulaciones con el modelo riguroso cubriendo un amplio rango de condiciones iniciales y se utilizó un 30% de los casos para ajustar los diferentes parámetros de los modelos aproximados.

Modelo Aproximado-1

Calcula la constante C en cada instante en base a las propiedades de flujo y de los fluidos. Utiliza un valor promedio de temperatura entre $T_\infty - T_{wb}$ y $T_\infty - T_{wb}$ para calcular las propiedades de los fluidos.

$$C = \frac{\sqrt{\pi} \cdot k_g(T_{avg}) \cdot Nu}{\rho_l \cdot L_v} \quad (10)$$

Modelo Aproximado-2

La constante C se calcula mediante una ecuación con coeficientes ajustados de parte del set de datos simulados con el modelo riguroso.

$$C = A_0 \cdot \tau^{n_0} + A_1 \cdot \tau^{n_1} \cdot (d \cdot |U|)^{c_i} \quad (11)$$

donde $\tau = T_\infty/25.0$ es una temperatura ambiente adimensionalizada, y A_i, n_i, c_i son los coeficientes ajustados cuyos valores dependen del Número de Reynolds

Modelo Aproximado-3

Incluye entre las variables la humedad relativa y una temperatura adimensional (Θ). Que permite considerar la temperatura inicial de la gota y el efecto de enfriamiento debido a la evaporación de la misma.

$$C = [A_0 \cdot \tau^{n_0} \cdot (1 - HR)^\alpha + A_1 \cdot \tau^{n_1} \cdot (d \cdot |U|)^{c_i} \cdot (1 - HR)^\beta] \cdot \Phi(\Theta) \quad (12)$$

donde Φ es una corrección a los cambios de temperatura no estacionarios

$$\Phi(\Theta) = \exp(\gamma\Theta + \delta\Theta^2)$$
$$\Theta = \frac{T_0 - T_{wb}}{T_\infty - T_{wb}}$$

3 Metodología de comparación

Para comparar tiempos de ejecución, se consideraron 25 casos representativos del espacio paramétrico 5D ($d_0, U, T_0, T_\infty, HR$), incluyendo cuatro esquinas extremas, seis casos de borde y quince casos interiores seleccionados mediante muestreo tipo hipercubo latino. Para cada caso y modelo se realizaron 10 ejecuciones cronometradas, descartando una ejecución inicial de calentamiento (warm-up).

Las métricas evaluadas incluyeron el tiempo medio de ejecución, el número de evaluaciones del término derecho del sistema de ODE (*sol.nfev*), y la cantidad de llamadas e iteraciones del método de Brent.

La precisión se obtuvo a partir de las trayectorias en formato CSV precomputadas en el barrido paramétrico completo, compuesto por más de 30000 simulaciones entre todos los modelos.

A fin de considerar correctamente las operaciones realizadas dentro de cada modelo, se definió la métrica Computational Work Units (CWU). En la cual se asignan pesos a las operaciones matemáticas básicas según su costo relativo siguiendo las recomendaciones de Muller (2016). Para operaciones de aritmética básica (+, -, *) 1.0 CWU, para división y raíz cuadrada 4.0 CWU y para funciones trascendentales y potencias (exp, log y x^y) 15.0 CWU.

El costo total fue calibrado mediante un profiler donde se analizaron las operaciones del solver y de las rutinas para obtener las propiedades físicas. Esto último se incluyó para distinguir, entre modelos que requirieron una única evaluación de propiedades (Aproximado-2 y Aproximado-3) de Aproximado-1 que requiere múltiples consultas de propiedades físicas de los fluidos.

4 Resultados y discusión

En la Tabla 2 se muestran los resultados de la comparación del modelo. La columna MAPE representa el error absoluto porcentual medio del tiempo de evaporación total de la gota mientras que la aceleración es el cociente redondeado entre el tiempo medio del modelo riguroso sobre el modelo comparado. Respecto a los modelos con simplificaciones físicas, La exclusión del flujo de Stefan (modelo No-Stefan) presenta un impacto despreciable tanto en el costo computacional como en la precisión, con un error del orden de 0,30%. En cambio, la simplificación del perfil térmico (modelo Perfil

Uniforme), al eliminar la búsqueda iterativa de la temperatura superficial T_s , permite reducir el costo computacional en aproximadamente un orden de magnitud (10x), manteniendo errores inferiores al 0,6%. Finalmente, la hipótesis de equilibrio térmico (modelo Equilibrio Térmico), que asume $T = T_{wb}$ y evita la integración de la ecuación diferencial de energía, introduce una reducción adicional cercana a otro orden de magnitud (10x) respecto al modelo de perfil uniforme.

El modelo riguroso presenta un costo aproximado de 13.265 CWU, dominado por las evaluaciones iterativas de propiedades dentro del bucle de Brent. En contraste, los modelos algebraicos, como Aproximado-2, reducen este costo a apenas 68 CWU, lo que representa una disminución cercana a dos órdenes de magnitud en el trabajo computacional.

Tabla 2. Temperatura utilizada en el cálculo de propiedades.

Modelo	Tiempo Medio [s]	MAPE [%]	Aceleración	nfev med.	Costo [CWU]
Riguroso	0.9055	0.00	1.0×	784	13,265
No-Stefan	0.8841	0.30	1.0×	774	1,650
Perfil-Uniforme	0.0918	0.55	11×	83	176
Equilibrio-Térmico	0.0085	0.53	129×	79	169
Aproximado-1	0.0028	16.01	381×	68	118
Aproximado-2	0.0016	6.02	619×	68	68
Aproximado-3	0.0017	6.29	576×	67	94

Cabe destacar que tanto Aproximado-2 como Aproximado-3 resultan más eficiente que Aproximado-1 (118 CWU), a pesar de exhibir un número similar de evaluaciones (n_{fev}). Esta diferencia se debe a que Aproximado-2 elimina completamente las consultas a tablas de propiedades físicas al calcular la constante C, operando exclusivamente mediante combinaciones algebraicas (potencias) de variables locales.

Respecto al error absoluto porcentual medio, las 3 suposiciones generaron un error promedio menor al 1%, mientras que los modelos aproximados Aproximado-2 y Aproximado-3 tuvieron un error porcentual medio cercano al 6%. En el caso de Aproximado-1, el cual no utilizó parámetros de ajuste, sino que la constante se calculó de propiedades físicas mostró un error medio de 16%. Es probable que la causa de este elevado error se deba a que para todas las propiedades se utilizó la temperatura promedio entre la de bulbo húmedo y la del aire y esto no sea lo suficientemente representativo del sistema.

En la Figura 1 se muestra función de distribución acumulada del error del tiempo de evaporación total obtenido en cada modelo respecto al modelo riguroso. En la misma se pueden identificar con claridad las tendencias de predicción de los distintos modelos. En particular, el modelo No-Stefan presenta una distribución centrada en torno a cero, lo que indica una alta precisión global con errores reducidos. Los modelos Perfil-Uniforme y Equilibrio-Térmico presentan curvas similares, con una mayor cantidad de casos donde se calculó un tiempo de evaporación menor al obtenido por el método riguroso, evidenciando un sesgo negativo. Por su parte, Aproximado-2 y Aproximado-3 muestran un sesgo positivo en más del 50% de los casos, asociado a una leve

sobrepredicción del tiempo de vida de la gota. En contraste, Aproximado-1 exhibe una cola pronunciada hacia errores negativos, alcanzando subpredicciones de hasta un 30% en casos extremos, lo que refleja una menor robustez en su capacidad predictiva.

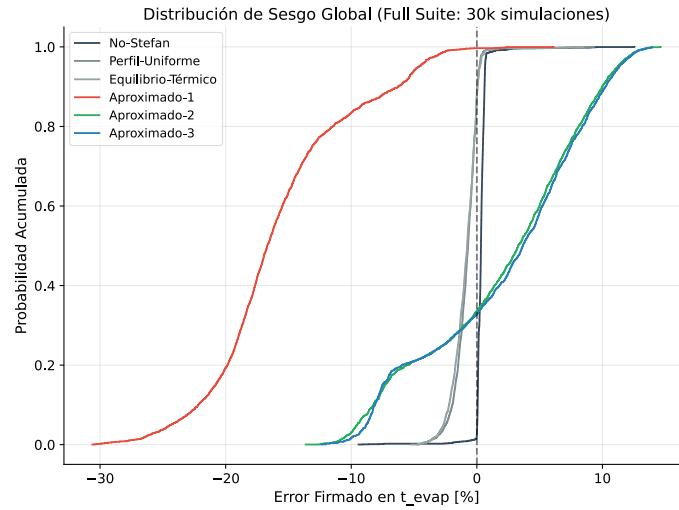


Fig. 1. Función de Distribución Acumulada de Error de tiempo de evaporación.

En la Figura 2 se muestra el diagrama de Pareto para comparar la precisión versus el costo computacional. Se observa que los modelos Aproximado-2 y Aproximado-3 se ubican en la región Pareto-óptima, al combinar errores moderados ($\text{MAPE} \sim 7\%$) con costos computacionales muy bajos (del orden de 10^2 CWU), lo que implica aceleraciones superiores a $500\times$ respecto del modelo riguroso. En particular, Aproximado-2 presenta el mejor compromiso global, con menor error que Aproximado-3 y un costo igualmente reducido, posicionándose como la alternativa más balanceada. Por el contrario, Aproximado-1 queda claramente dominado, al exhibir tanto mayor error ($\sim 16\%$ MAPE) como un costo computacional superior dentro del conjunto de modelos algebraicos.

En el extremo de alta precisión, los modelos físicos simplificados (Perfil-Uniforme y Equilibrio-Térmico) logran errores cercanos al modelo riguroso ($\sim 1\%$ MAPE), a costa de un incremento en el costo computacional. Seleccionar unos de estos modelos o los modelos aproximados convenientes dependerá de si es la precisión o el costo computacional lo que restringe el uso del modelo. Finalmente, el modelo No-Stefan, si bien mantiene una precisión prácticamente equivalente al modelo riguroso, conserva un costo computacional elevado, lo que limita su conveniencia en aplicaciones donde la eficiencia es crítica.

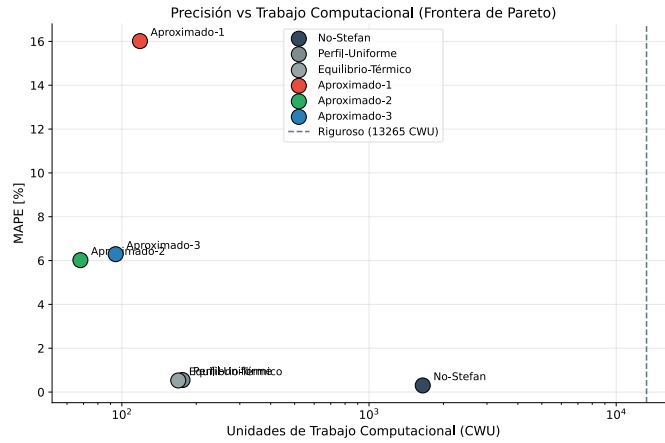


Fig. 2. Función de Distribución Acumulada de Error de tiempo de evaporación.

La Tabla 3 resume el desempeño de los distintos modelos en la predicción del tiempo total de evaporación, reportando métricas globales de error (MAPE), errores extremos (Error Máx, P95 y P99) y sesgo promedio. En términos generales, los modelos con simplificaciones físicas conservan una alta precisión: No-Stefan presenta el menor MAPE (0.40%) y errores percentiles muy bajos (P95 = 0.67%, P99 = 2.40%), mientras que Perfil-Uniforme y Equilibrio-Térmico mantienen errores igualmente acotados (MAPE $\approx$ 1%) con leves incrementos en los percentiles y un sesgo negativo moderado. En contraste, los modelos aproximados muestran un deterioro significativo en todas las métricas, especialmente Aproximado-1, con un MAPE elevado (15.75%) y errores extremos superiores al 30%, evidenciando limitaciones para capturar adecuadamente la física del proceso. Los modelos Aproximado-2 y 3 mejoran sustancialmente respecto al primero, aunque aún presentan errores (MAPE $\approx$ 6%) y percentiles altos (P95 $\approx$ 11–12%), junto con sesgos positivos que indican una tendencia a sobreestimar el tiempo de evaporación.

Tabla 3. Error en el tiempo de evaporación total de la gota respecto al resultado riguroso.

Modelo	MAPE [%]	Error Máx [%]	P95 [%]	P99 [%]	Sesgo (Bias) [%]
No-Stefan	0.40	12.54	0.67	2.40	0.33
Perfil-Uniforme	0.94	9.32	2.55	3.90	-0.84
Equilibrio-Térmico	1.03	8.51	2.70	3.95	-0.92
Aproximado-1	15.75	30.61	24.34	27.74	-15.73
Aproximado-2	6.04	14.64	11.37	12.85	2.05
Aproximado-3	6.17	13.97	11.39	12.77	2.27

Respecto a los casos con mayor error, para el modelo No-Stefan, se concentran en casos con gotas pequeñas ($\approx 100 \mu\text{m}$) en condiciones de velocidad nula ($U = 0$) y la gota parte

de una temperatura significativamente distinta de la del ambiente (por ejemplo, 5 °C frente a 20–45 °C, o 35 °C frente a 15–25 °C). En estos casos se amplifica el impacto del transitorio térmico inicial y el método numérico usado como solver presenta los mayores problemas. Los otros modelos simplificados (Perfil-Uniforme y Equilibrio-Térmico) presentan sus máximos errores en prácticamente los mismos casos que el modelo No-Stefan. No obstante, la magnitud del error máximo en estos modelos simplificados es levemente inferior (9% frente a 12.5%). El modelo Aproximado-1 presenta los mayores errores en condiciones de baja temperatura y alta humedad, lo que indica su incapacidad para representar adecuadamente la inhibición de la evaporación cuando la gota se encuentra próxima al equilibrio con un ambiente casi saturado. En contraste, el modelo Aproximado-2 tiene la mitad de error que el modelo Aproximado-1, evidenciando una mejora sustancial en la representación global del fenómeno; sin embargo, sus principales desviaciones se trasladan hacia el régimen de altas temperaturas y elevada convección en gotas de mayor tamaño, donde la formulación tipo ley de potencia tiende a sobreestimar la tasa de transferencia. Por su parte, el modelo Aproximado-3 presenta un comportamiento comparable al Aproximado-2.

5 Conclusiones

En este trabajo se presentó la comparación de modelos de evaporación de gotas con simplificaciones física y aproximaciones algebraicas (aproximados) frente a un modelo riguroso. Se evaluaron tanto la precisión como el costo computacional de cada enfoque en un espacio paramétrico representativo, considerando distintas simplificaciones físicas y su impacto en el desempeño global. Asimismo, se propuso y validó una familia de modelos aproximados.

Los resultados mostraron que, dentro de los modelos aproximados, el modelo Aproximado-2 ofrece el mejor compromiso entre fidelidad física y eficiencia computacional, alcanzando un MAPE cercano al 6% con una aceleración superior a 600× respecto al modelo riguroso. Aproximado-3 constituye una opción complementaria, ya que permite incluir el efecto de la temperatura inicial de la gota como variable de entrada.

El análisis de simplificaciones físicas evidencia que la exclusión del flujo de Stefan tiene un impacto despreciable en la precisión (~0,30%) y en el tiempo de ejecución, mientras que la principal fuente de costo computacional en el modelo riguroso proviene de la combinación de resoluciones iterativas al aplicar el método de Brent. La imposición de un perfil térmico uniforme elimina este cuello de botella, logrando reducir en un orden de magnitud el tiempo de cómputo con errores inferiores al 1%. A su vez, la hipótesis de equilibrio térmico permite evitar la integración de la ecuación de energía, alcanzando una aceleración total cercana a dos órdenes de magnitud (~100 veces) dentro de la familia de modelos físicos.

Actualmente se ha comenzado a explorar el uso de modelos sustitutos, así como el desarrollo de redes neuronales informadas por la física (PINNs), con el objetivo de mejorar la capacidad predictiva manteniendo bajos costos computacionales

Referencias

- Abramzon, B. & Sirignano, W.A. (1989). Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 32(9), 1605–1618.
- Aggarwal, S.K. & Peng, F. (1995). A review of droplet dynamics and vaporization modeling for engineering calculations. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 117(3), 453–461.
- Agarwal, A., Wang, Y., Liang, L., Naik, C., & Meeks, E. (2019). The computational cost and accuracy of spray droplet collision models. *SAE Technical Paper 2019-01-0279*
- Both, A., Mira, D. & Lehmkuhl, O. (2022). Evaporation of volatile droplets subjected to flame-like conditions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 184, 122294.
- Crowe, C. T., Schwarzkopf, J. D., Sommerfeld, M., & Tsuji, Y. (2012). *Multiphase flows with droplets and particles* (2nd ed.). CRC Press
- Dodd, M.S., Mohaddes, D., Ferrante, A. & Ihme, M. (2021). Analysis of droplet evaporation in isotropic turbulence through droplet-resolved DNS. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 172, 121157.
- Dombrovsky, L. A., & Sazhin, S. S. (2003). A parabolic temperature profile model for heating of droplets. *Journal of Heat Transfer*, 125(3), 535–537.
- Feng, Y., Li, D., Marchisio, D. L., Vanni, M., & Buffo, A. (2023). A computational fluid dynamics–population balance equation approach for evaporating cough droplets transport. *International Journal of Multiphase Flow*, 165, 104500.
- Finneran, J., Garner, C. P., & Nadal, F. (2021). Deviations from classical droplet evaporation theory. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 477(2251), 20210078.
- Irfan, M., & Muradoglu, M. (2017). A front tracking method for direct numerical simulation of evaporation process in a multiphase system. *Journal of Computational Physics*, 337, 132–153.
- Ranz, W.E. & Marshall, W.R. (1952). Evaporation from drops. *Chemical Engineering Progress*, 48(3), 141–146; 48(4), 173–180.
- Renaudo, C. A., Bertin, D. E., & Bucalá, V. (2022). A coupled atomization–spray drift model as online support tool for boom spray applications. *Precision Agriculture*, 23(6), 2345–2371.
- Sazhin, S.S. (2006). Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32(2), 162–214.
- Shao, C., Jin, T., & Luo, K. (2022). The interaction between droplet evaporation and turbulence with interface-resolved direct numerical simulation. *Physics of Fluids*, 34(7), 072102.
- Sirignano, W.A. (1999). *Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays*. Cambridge University Press.
- Xia, L., Montazeri, H., & Blocken, B. (2025). On the accuracy of Eulerian–Lagrangian CFD simulations for spray evaporation in turbulent flow. *International Journal of Thermal Sciences*, 208, 109461.
- Zhou, Z.F., Li, W.Y., Chen, B. & Wang, G.X. (2017). A 3rd-order polynomial temperature profile model for the heating and evaporation of moving droplets. *Applied Thermal Engineering*, 110, 162–170.