## Escola Politécnica da Universidade de São Paulo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

Investigação Numérica da Queima Individual de Gotas em Chamas Turbulentas de Sprays Multicomponentes

Projeto de Pesquisa para Doutorado Direto Submetido à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP)

M.Sc. João Vinícius Hennings de Lara

## Orientador:

Prof. Dr.-Ing. Fernando Luiz Sacomano Filho

São Paulo, Junho de 2025

## Resumo

A combustão turbulenta de spray é um processo comumente encontrado em diversas tecnologias em diversos setores econômicos. O aperfeiçoamento de sua modelagem e simulação faz parte do esforço atual para transição energética e descarbonização. Simulações de combustão de 3 sprays diluídos, baseadas na dinâmica dos fluidos computacional, geralmente utilizam modelos de evaporação e condensação para as gotas, os quais descrevem uma frente de chama externa às 5 gotas. No entanto, chamas estabilizadas ao redor de gotas individuais também são observadas em experimentos e simulações. Denominadas combustão de gota isolada, essas chamas estão relacionadas ao processo de ignição de sprays e à formação de fuligem. Contudo, a sua modelagem é raramente incluída em simulações computacionais. Este trabalho visa desenvolver modelos de combustão de gota isolada (MCGI) e incluí-los em simulações multidimensionais 10 de chamas turbulentas para investigar a sua influência na combustão de sprays. Esse desenvol-11 vimento inclui a elaboração de modelos de evaporação e condensação (MEC). Ambos devem 12 ser capazes de representar efeitos de combustíveis comerciais, os quais são multicomponentes 13 (como a gasolina) e/ou hidrofílicos (como o etanol, o metanol e a amônia). Para tanto, devem ser considerados também fenômenos de transporte no interior da gota e termodinâmica de 15 mistura não ideal. Dessa forma, um segundo objetivo deste trabalho é avaliar os impactos do 16 aumento de capacidade descritiva de modelos MEC e MCGI na combustão de sprays. Deve ser 17 desenvolvido também um mecanismo de seleção para determinar qual modelo utilizar em cada 18 gota. Esse trabalho contribuirá para o aperfeiçoamento da capacidade preditiva de simulações 19 multidimensionais de chama turbulenta de sprays multicomponentes.

## **Abstract**

Turbulent spray combustion is commonly found in a myriad of technologies across different economic sectors. The improvement of its modeling and simulation is part of the effort towards energy transition and decarbonization. Simulations of diluted spray combustion, based on 3 computational fluid dynamics (CFD), often use droplet condensation and evaporation models. These describe a reaction zone external to the droplets, stabilized by the vapor-oxidizer mixture formed by the evaporation of fuel droplets. However, flames stabilized around individual particles are also observed in experiments and simulations. Named isolated droplet combustion, 7 these flames are related to spray ignition processes and soot formation, yet their modeling is seldom included in simulations. This work aims to develop models for isolated droplet combustion (MCGI) and include them in turbulent spray combustion simulations. This development 10 includes developing droplet evaporation and condensation models (MEC). Both ought to be 11 able to represent effects of commercial fuels, which are multicomponent (as gasoline) and/or 12 hydrophilic (as ethanol, methanol and amonia). For this purpose, transport phenomena inside 13 the droplet and non-ideal mixture themodynamics must also be considered. Thus a second 14 objetive of this work is to assess the impacts of increasing the capabilities of droplet heat and 15 mass transport models (MEC and MCGI) in spray combustion simulations. The simultaneous use of MEC and MCGI, as proposed, requires a switch mechanism, also to be developed, to se-17 lect which model to use in each droplet. This work will contribute to the predictive capabilities of multidimensional simulations of turbulent multicomponent spray combustion.