

Multi-Scale Investigations For Reacting Multi-Phase Dispersed Spray Flows

João Vinícius Hennings de Lara

April 2025

1 Introdução

A demanda pela transição energética e pela descarbonização da economia busca alternativas pela substituição dos combustíveis fósseis nos setores de energia, transporte, indústria. Alguns setores, como o energético e o de transportes urbano de baixa carga, têm mostrado grande progresso no uso de energias renováveis e na eletrificação, respectivamente [src]. Porém, combustíveis fósseis são extremamente difíceis de substituir em outros setores, como o de transporte de carga pesada, aéreo e marítimo, e em algumas indústrias como aço e cimento [src]. Isso se deve, em parte, à elevada densidade energética e energia específicas dos combustíveis fósseis, especialmente os combustíveis líquidos [src], mas também à extensa infraestrutura de transporte, distribuição e armazenamento para combustíveis líquidos já existente. [src] Além disso, uma análise histórica indica que a transição para fontes renováveis se dará ao longo de décadas [Masri 2021].

Nota-se que processos de combustão continuarão relevantes nas próximas décadas e soluções devem ser procuradas para conciliar essa demanda com os esforços de transição energética e descarbonização da economia. A comunidade científica busca, então, três caminhos: (i) novos combustíveis; (ii) novas origens para os mesmos combustíveis; (iii) melhorar a eficiência dos motores a combustão e reduzir a formação de poluentes. A primeira abordagem consiste em desenvolver o uso de combustíveis que não poluam – como hidrogênio, amônia e pós metálicos – ou que poluam menos – como OMEs e naphta (ver [Masri 2021]) – ou que venham de outras fontes – como o etanol e o metanol. Dentre as fontes não fósseis, se destacam os bio-combustíveis, produzidos a partir de biomassa renovável, e o eletrocombustíveis, sintetizados a partir de água, gás carbônico e energia de fontes renováveis. Em particular o etanol é importante para o Brasil ... TODO

Independente da origem do combustível, o processo de combustão deve ser compreendido para que motores e queimadores eficientes e com baixa formação de poluentes sejam desenvolvidos. Para tanto é necessário pesquisa em combustão, que pode ser estruturada em trabalhos experimentais ou trabalhos de modelagem. Em particular, a modelagem da com-

bustão turbulenta de sprays é bem desafiadora, devido aos diversos fenômenos envolvidos. São escoamentos particulados, dispersos e reativos, que envolvem fenômenos multi-escala, multifásicos e, frequentemente, combustíveis multicomponente. Revisando a literatura mais recente, o autor notou a ausência de estudos investigando a influência de modelar a combustão de gota isolada na estrutura da chama. Ademais, há um atraso em termos de complexidade na utilização de modelos de transferência de massa e calor (HMT - *heat and mass transfer*) em gotas nas simulações de larga escala, em comparação com simulações de uma única gota.

Na área da modelagem, que é foco dessa pesquisa Como se entende o processo ... experimento e modelagem ... foco em modelagem e simulação ... CFD. A simulação de combustão gasosa já é bem complexa, em parte devido à coexistência de fenômenos químicos e fenômenos de transporte, assim pela influência da turbulência e as interações entre esses aspectos. A combustão de sprays traz a complexidade adicional de possuir duas fases: uma fase contínua e gasosa, e uma fase dispersa, geralmente líquida. Escoamentos bifásicos como no caso de aerossóis ou sprays já são bem complexos, mesmo quando não reativos.

A modelagem para a simulação de escoamentos reativos, dispersos e multifásicos, como na combustão de sprays, requer três partes: (i) a modelagem da fase contínua gasosa; (ii) a modelagem da fase dispersa, líquida; (iii) a modelagem da química homogênea, i.e. da combustão na fase gasosa. Para a parte (iii), a maioria dos trabalhos de combustão de sprays utiliza metodologias desenvolvidas para a combustão gasosa, considerando as gotas apenas como fontes de vapor de combustível. Isso corresponde

1.1 Objetivo

Desenvolver um modelo

2 Fundamentação Teórica

2.1 Transferencia de calor e massa em gotículas

2.2 Single Droplet Burning

2.3 Combustão Turbulenta de sprays

3 Metodologia

No context de desenvolvimento de modelos analíticos de HMT, o projeto visa incluir os seguintes aspectos: (i) modelo de combustão de gota isolada; (ii) aspecto multicomponente; (iii) modelagem do interior da gota. Para atingir esse objetivo, o desenvolvimento será gradual e dividido em etapas. Cada modelo analítico será desenvolvido sozinho, em seguida integrado com as outras capacidades. Para cada um dos três aspectos listados acima, serão realizadas as seguintes etapas:

- A. Busca e análise de modelos já existentes na literatura;
- B. Desenvolvimento analítico do novo modelo;
- C. Implementação do novo modelo no CHEM1D;
- D. Simulação e análise dos resultados, incluindo avaliação de desempenho do modelo.

A cada nova capacidade adicionada ao modelo, as anteriores serão mantidas, de modo que este se torna cada vez mais complexo e abrangente. Após desenvolver, implementar e testar os modelos no CHEM1D, prevê-se a implementação do modelo no OpenFOAM. Desse modo, faz-se necessárias as seguintes etapas:

- E. Estudar como implementar modelos no CHEM1D;
- F. Estudar C++;

G. Estudar como implementar modelos no OpenFOAM;

4 Plano de Trabalho

Assim, podem ser determinadas as seguintes etapas do projeto:

1. Modelagem analítica de combustão de gota isolada monocomponente com modelo avançado de evaporação;
2. Modelagem analítica de discretização do interior de gota monocomponente;
3. Acoplamento de modelos monocomponente de combustão de gota isolada com discretização no interior da gota;
4. Modelagem analítica de combustão de gota isolada multicomponente com modelo avançado de evaporação;

Nota: Deve-se diferenciar aqui diferentes possibilidades: como gota bicomponente sendo apenas um o combustível, exemplo etanol anidro, e gota bi- ou multicomponente com mais de um componente volátil e combustível.

Adendo: Essa etapa pode eventualmente ser dividida em mais de uma etapa, devido aos diferentes cenários possíveis.

5. Modelagem analítica de discretização do interior de gota multicomponente;
6. Acoplamento de modelos multicomponente de combustão de gota isolada com discretização no interior da gota;
7. Estudar modelos de determinação de probabilidade de gotas entrarem no modo de combustão isolada;
8. Implementar novos modelos no CHEM1D;

9. Implementar novos modelos no OpenFOAM;
10. Estudar como novo modelo se encaixa no contexto de interação gota-chama;
11. Estudo de chamas turbulentas com todos novos modelos acoplados.

4.1 Cronograma de Execução

Tabela com cronograma.

4.2 Disciplinas a serem cursadas

5 Forma de Análise dos Resultados

Referências

[Masri 2021]MASRI, A. Challenges for turbulent combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 38, n. 1, p. 121–155, 2021. ISSN 1540-7489. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1540748920306350>>.