

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 para 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, especialmente os combustíveis líquidos. São estes os que possuem maior energia específica e densidade energética, sendo os mais adequados para aplicações de transporte, como no setor automotivo de cargas pesadas, naval e aeronáutico. Além do setor de transporte, combustíveis líquidos são importantes para algumas indústrias como aço e cimento [src], para algumas termoeletricas e até para máquinas de pequeno porte, portáteis, movidas a motor de combustão interna (MCI). Por fim, 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. Em especial, todas as aplicações mencionadas baseiam-se na combustão turbulenta de sprays líquidos. Assim, soluções devem ser procuradas para conciliar essa tecnologia 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.

Independente da origem do combustível, o processo de combustão deve ser compreendido para que motores e queimadores eficientes e com baixa emissão de poluentes sejam desenvolvidos. Para tanto é necessário pesquisa em combustão, que pode ser estruturada em trabalhos experimentais ou trabalhos de modelagem. A modelagem da combustão turbulenta de sprays, foco desse trabalho, deve ser capaz de representar diferentes combustíveis líquidos, atendendo combustíveis oriundos das demandas (i) e (ii), assim como representar os diferentes fenômenos envolvidos nesse processo, como ignição e formação de poluentes, de

forma a atender a demanda (iii). Nesse âmbito, é de extrema importância o modelo de transferência de calor e massa da gota, líquida, para a fase gasosa, ou seja, o modelo de vaporização e condensação das gotas do spray. É conhecido que essa modelagem tem enorme influência na chama como um todo [src], influenciando a sua estrutura, temperatura, geometria e, por consequência, formação de poluentes também.

Nesse sentido, revisando a literatura mais recente, nota-se a necessidade de maior desenvolvimento desses modelos HMT (*Heat and Mass Transfer*) para representar corretamente diferentes combustíveis. Por exemplo, modelos simples não são capazes de representar todos os fenômenos associados, por exemplo, à combustão de etanol. Em especial, nota-se uma demanda pela aplicação de modelos complexos, desenvolvidos e testados na escala de uma única gota, em simulações de larga escala da chama como um todo. Para representar combustíveis como o etanol, anidro ou hidratado, é necessário uma modelar a gota de forma **multicomponente**, considerando **termodinâmica de mistura não-ideal** e os efeitos de transferência de calor e massa no **interior da gota**.

No modelo HMT descrito acima, a reação química é resolvida separadamente do modelo da gota. Isso corresponde a uma chama longe e não presa a gota, em que a chama é alimentada pelo vapor de combustível oriundo de várias gotas evaporando. Em contraste, é possível que ocorra a combustão de uma gota isolada, com uma frente de chama próxima e circundante à gota, a uma distância na mesma ordem de grandeza que o diâmetro da gota. Isso é chamado **combustão de gota isolada** (*single droplet combustion*). Revisando a literatura, constatou-se que não é muito claro quando a combustão de gota isolada ocorre, nem o seu efeito na chama em larga escala. Sabe-se que a combustão de gota isolada é isolada é importante para a ignição do spray [AggarwalS2014], mas não foram encontrados estudos sobre o seu impacto na estrutura da chama.

1.1 Objetivos

Com isso em vista, a presente tese visa estudar e desenvolver modelos analíticos para a transferência de calor e massa em gotas em dois cenários:

- A. Modelo de Evaporação e Condensação (MEC); e
- B. Modelo de Combustão de Gota Isolada (MCDI).

Esses modelos devem considerar os seguintes aspectos:

1. Descrição multicomponente da gota;
2. Mistura com termodinâmica não-ideal;
3. Efeitos de transferência de calor e massa no interior da gota.

O objetivo é desenvolver simulações de larga escala com ambos modelos, A e B, com a capacidade:

4. Determinação de quando ocorre a combustão de gota isolada;

ou seja, de determinar se utiliza modelo A ou o modelo B. Dessa forma, o autor visa investigar o efeito de considerar a combustão de gota isolada, e dos aspectos 1, 2 e 3, na estrutura da chama. A investigação da estrutura da chama inclui a investigação de aspectos como distribuição de temperatura e concentrações de espécies, o que é essencial para a determinação da ignição, da eficiência de combustão e das emissões de poluentes.

2 Fundamentação Teórica

2.1 Transferência de Calor e Massa em Gotas

2.1.1 Modelos de Evaporação e Condensação Monocomponente

O primeiro MEC foi desenvolvido por [Fuchs] na década de 1960. Esse modelo considera apenas a difusão de massa de e para a gota, representando assim evaporação e condensação.

Por considerar apenas o transporte por difusão, a taxa de variação da massa da gota, desse modelo depende linearmente da diferença de fração mássica da espécie na superfície e no ambiente.

Porém, o fluxo de massa provocado pelo fenômeno de evaporação torna relevante o transporte de massa por convecção, chamado de *Stefan flow* nesse contexto. Assim, o modelo de Stefan-Fuchs considera os transportes por condução e convecção para/da gota e por isso é muito mais utilizado que o modelo de Fuchs. O fluxo de massa nesse caso tem uma dependência logarítmica com a diferença de fração mássica do combustível. [Williams, Turns] Esse modelo usa o chamado número de transporte de Spalding, introduzido por [Spalding], que pode ser derivado da equação de temperatura ou de espécie, originando B_T e B_M .

Ambos modelos de Fuchs e de Stefan-Fuchs assumem gotas esféricas, num ambiente quiescente, em regime quasi-estacionário, considerando o interior da gota com temperatura e concentração uniforme e desconsiderando a inércia térmica da gota. Essa última hipótese significa que a parte térmica do modelo não é capaz de prever o período de aquecimento da gota, antes da evaporação. Isso altera significativamente a chama em larga escala, já que o período de aquecimento da gota é comparável ao tempo de combustão [source?] [Q: burn time = tempo de combustão?] Por esse motivo, Abramzon e Sirignano [Sirignano1989] melhoraram o modelo corrigindo o número de transporte de temperatura de Spalding e atualizando a correlação entre os números de transporte de Spalding para incluir números de Lewis não unitários.

Além disso, os autores utilizam-se da teoria de filme (*film theory*) para considerar os efeitos do *Stefan flow* na camada limite da partícula, corrigindo o uso das expressões experimentais para um ambiente convectivo.

O modelo Abramzon-Sirignano é baseado na hipótese de equilíbrio termodinâmico na interface líquido-gás. Por outro lado, dois anos antes, Bellan e Harstad [BellanHarstad] desenvolveram o modelo que inclui a condição de não equilíbrio termodinâmico na interface.

Sazhin em [Sazhin2006PECS] comparou o modelo Stefan-Fuchs (chamado de clássico)

com o modelo de Abramzon-Sirignano e com correlações experimentais desenvolvidas para hidrocarbonetos alcanos. Ele obteve que o modelo de Stefan-Fuchs obtém as maiores taxas de evaporação, enquanto as correlações obtém as taxas mais conservadoras; o modelo de Abramzon-Sirignano obtendo valores intermediários, mais próximos das correlações experimentais que do modelo clássico.

Miller [Miller1999] comparou os modelos de Ambrazon-Sirignano e Bellan-Harstad e combinou-os em uma única representação matemática. [TODO: *A sua comparação mostrou ...*]

Sacomano [Sacomano2019] comparou os modelos de AS e BL usando a formulação de Miller1999 [TODO: *na situação ...*]. Também comparou diferentes modelos de pressão de vapor de combustível na superfície da gota. [TODO: *Ele encontrou ...*]

Seguindo uma abordagem totalmente diferente, baseada em cinética ao invés de fenômenos de transporte, o modelo de Hertz-Knudsen-Langmuir [Langmuir] propõe uma formula para a taxa de variação da massa da gota.

2.1.2 Modelos de Evaporação e Condensação Multicomponente

2.1.3 Modelos para o Interior da Gota

2.2 Combustão de Gota Isolada

2.2.1 Gotas Mono- e Multi-Componente

2.2.2 Modelos de Modo de Combustão de Gotas

2.3 Combustão Turbulenta de Sprays

2.3.1 Modelagem da Fase Contínua

Modelagem CHEM1D

Modelagem LES

2.3.2 Modelagem Química

Mencionar química detalhada para CHEM1D

Introdução FGM e ATF

3 Metodologia

No contexto 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 Excecução

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>>.