

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

João Vinícius Hennings de Lara

April 2025

1 Introdução

No cenário atual de busca pela transição energética e descarbonização, a pesquisa em combustão é mais importante do que nunca. Nesse contexto, os principais objetivos são reduzir emissões, adaptar os modelos para novos combustíveis mais limpos e para novos modos de combustão, necessários para motores mais limpos.

Análises históricas indicam que a transição para fontes de energia renováveis se dará ao longo de décadas [Masri 2021], [MASRI 1, 3 também]. Até lá, combustíveis fósseis mantêm o seu domínio. Além disso, no setor de transportes, a eletrificação dificilmente substituirá combustíveis fósseis em veículos de cargas pesadas ou para transporte aéreo ou marítimo, mesmo considerando previsões otimistas para o desenvolvimento de baterias [Masri 2021].

O mesmo pode ser dito para processos industriais intensivos em energia, como cimento e aço.

Uma opção para a descarbonização desses setores é o uso de eletrocombustíveis, também chamados de *e-fuels*, *power-to-x* (PtX) ou *powerfuels*. Estes são combustíveis líquidos ou gasosos produzidos a partir de água, gás carbônico (CO₂), eventualmente nitrogênio N₂ e energias de fontes renováveis. Pode-se produzir, por exemplo: hidrogênio, metano, metanol, hidrocarbonetos líquidos (processo Fischer-Tropsch), éteres de oximetileno (OMEs) e amônia (processo Haber-Bosch). sourceMASRI 9. Os combustíveis PtX podem utilizar a infraestrutura de transporte, distribuição e armazenamento já existente dos combustíveis fósseis [src MASRI 9-13] e podem chegar a ser neutros em termos de emissões, apesar que ainda mais caros que combustíveis de origem fóssil [src MASRI 42, 43].

Outra alternativa para combustíveis de origem fóssil são os combustíveis verdes ou bio-combustíveis, produzidos a partir de plantas. Por exemplo, o etanol e o metanol produzidos a partir do bagaço de cana, tecnologia desenvolvida no Brasil; ou o etanol produzido a partir de milho, como nos Estados Unidos; ou o metano advindo da biomassa. [src E]sses combustíveis reduzem ...

Outra alternativa ainda é o uso de pós metálicos...

Exemplo de citação [Wu et al. 2023].

1.1 Objetivos

Desenvolver um modelo

2 Fundamentação Teórica

Nessa seção será apresentado o sistema de equações que governa combustão de spray turbulenta = sistema particulado disperso.

2.1 Modelagem da fase contínua

Equações continuidade, momento, energia, espécie no formato DNS point-particle. Incluir two-phase coupling terms.

Mencionar que RANS vem desse conjunto de equações após operação de Média Reynolds e média Favre. LES vem desse sistema após operação de filtro e filtro Favre. DNS vem da solução desse sistema, ou desse sistema após transforção.

2.2 Modelagem da fase dispersa

Posição

Velocidade

Temperatura e Massa j - HMT

diâmetro vem de equaçãozinha rápida

2.2.1 Modelo de Evaporação Stefan-Fuchs

Derivação uhul.

Diagrama, Equações, condições de controno.

Hipóteses. Resultado obtido: formula clássica de Evaporação

Críticas? Defeitos?

2.2.2 Modelo de Combustão Isolada Stefan-Fuchs

Derivação uhul.

Diagrama, Equações, condições de controno.

Hipóteses. Resultado obtido.

Críticas? Defeitos? Questões abertas?

3 Pesquisa Bibliográfica

3.1 Modelos de Evaporação

Além do modelo clássico, aqui chamado de Stefan-Fuchs.

Modelo Ambrazon-Sirignano

Miller-Bellan-Harstad

Langmuir-Knudsen

Maionchi-Fachini

Integral time scale

3.2 Modelos de Evaporação Multicomponente

DMC model.

Continuous Thermodynamics approach? See JennyB#Refs=

7, 142, 147, 148, 253

3.3 Modelos de Interior de Gota

Effective conductivity

Sazhin model

Hill vortex model, Diffusivity model

3.4 Modelos de Combustão de Gota Isolada

Godsave-Spalding

Aquele lá pica do alumínio, o último da sequência de 3

Modelos que resultam em um sistema de equações algébricos (fora do escopo)

3.5 Considerações para fechamento

Modelos de pressão de vapor na superfície

Como se define e onde se calcula as propriedades de transporte? Lei do $1/3$ é criticada (ver Jenny também)

Modelos de filme? Particle BL?

4 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;

5 Plano de Trabalho e Cronograma de Execução

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.

Tabela com cronograma.

5.1 Disciplinas a serem cursadas

Necessário?

6 Resultados Esperados

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>>.

[Wu et al. 2023]WU, Y. et al. Numerical study on flame propagation of nano- and micron-sized aluminum dust combustion in air. *Powder Technology*, v. 430, p. 118977, 2023. ISSN 0032-5910. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S003259102300760X>>.