

Investigações Multi-Escala para Escoamentos Multifásicos Dispersos Reativos

João Vinícius Hennings de Lara

April 2025

Sumário

1	Introdução	3
1.1	Objetivos	5
2	Fundamentação Teórica	5
2.1	Combustão Turbulenta de Sprays	5
2.1.1	Modelagem da Fase Contínua	6
2.1.2	Modelagem Química	6
2.2	Modelos de Evaporação e Condensação (MEC)	7
2.2.1	Modelos com Interior de Gota Homogêneo	8
2.2.2	Modelos para o Interior da Gota	8
2.3	Modelos de Combustão de Gota Isolada (MCGI)	8
2.3.1	Modelos de Modo de Combustão de Gotas	8
3	Metodologia	8
4	Plano de Trabalho	9
4.1	Cronograma de Excecução	10
4.2	Disciplinas a serem cursadas	10
5	Forma de Análise dos Resultados	10

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 [Reviews de Al], sendo os mais adequados para aplicações de transporte, como no setor automotivo de cargas pesadas, naval e aeronáutico (MASRI, 2021). Além do setor de transporte, combustíveis líquidos são importantes para algumas indústrias como aço e cimento, 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, incluindo combustíveis oriundos das demandas (i) e (ii). Deve também representar os diferentes fenômenos envolvidos nesse processo, como ignição e formação de poluentes,

de forma a atender a demanda (iii). No âmbito da combustão turbulenta de sprays, é de extrema importância o modelo de transferência de calor e massa da gota (líquida) para a fase gasosa, ou seja, o modelo de evaporação e condensação das gotas do spray. É conhecido que essa modelagem tem enorme influência na chama como um todo [Jenny], 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 de evaporação e condensação (MEC) 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**. Revisando a literatura, constatou-se que não é muito claro quando a combustão de gota isolada ocorre [src], nem o seu efeito na chama em larga escala. Sabe-se que a combustão de gota 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 Combustão Turbulenta de Sprays

A combustão turbulenta de sprays é caracterizada pela competição de vários processos físicos e químicos, fortemente acoplados e em diferentes escalas de tempo e comprimento.

Na formação de um spray turbulento, um jato de combustível líquido se quebra devido a instabilidades hidrodinâmica de Kelvin-Helmholtz e Rayleigh-Taylor, formando gotas que se dispersam, deformam e atomizam devido às forças aerodinâmicas superando as tensões superficiais da gota. Isso forma o regime denso do spray, onde ocorre também outros fenômenos como colisões, coalescência e interferência por esteira aerodinâmica, turbulência ou por alteração da concentração de vapor de combustível devido à evaporação. À medida que o jato se atomiza em gotas menores e dispersas, as gotas deixam de interferir umas nas outras e o regime é chamado de disperso ou diluído. As gotas de combustível evaporam, fornecendo vapor combustível para a chama, que por sua vez influencia e é influenciada pelas próprias gotas e pela turbulência local. Revisões detalhadas e com mais referências para processos e interações na combustão turbulenta de sprays podem ser encontradas em [JennyB2012, MasriA2016 SanchezA2015, ZhouL2021].

O foco deste trabalho é na modelagem das escalas micro (da gota) e macro (do spray e da chama) da região diluída de um spray de combustível líquido. Modelar a escala macro requer um modelo para a fase contínua, gasosa, um modelo para as reações químicas e um modelo para a fase dispersa, as gotas. Dois exemplos de modelos para a fase contínua e para a química, escolhidos por relevância e experiência no grupo de pesquisa, serão apresentadas nas próximas Subseções 2.1.1 e 2.1.2. Atenção especial será dada para a modelagem da gota, uma vez que o foco desse trabalho é desenvolver novos modelos para essa escala e investigar os efeitos na escala da chama. Modelos de transferência de calor e massa em gotas são discutidos nas Seções 2.2.

2.1.1 Modelagem da Fase Contínua

Modelagem CHEM1D. Modelagem LES. Experiência com DTF.

2.1.2 Modelagem Química

Mencionar química detalhada para CHEM1D. Introdução FGM.

2.2 Modelos de Evaporação e Condensação (MEC)

Na escala uma gota, o problema pode ser dividido em duas regiões segregadas: a gota, líquida; e o gás ambiente circundante. Cada região é governada por um conjunto de equações. Ambas regiões podem ser resolvidas numericamente (simuladas) ou modeladas com um resultado analítico. Ambas regiões podem ser modeladas com diferentes graus de fidelidade. Trabalhos que resolvem numericamente tanto o interior quanto o exterior da gota são capazes de simular muitos efeitos físicos a um elevado custo computacional (veja *[Resolved evap small scale.]*). Por viabilizar o uso em simulações na escala da chama de spray, mais comuns são modelos que usam um modelo analítico em uma região e simulam a outra. Geralmente, uma solução analítica é utilizada para a descrição espacial da fase gasosa e as propriedades da gota são integradas no tempo.

No que tange a região líquida, do interior da gota, a hipótese mais simples é assumir uma distribuição homogênea de temperatura e espécie no interior da gota e negligenciar recirculação. Isso elimina a necessidade de modelar o interior da gota. Para a região gasosa, é Dessa forma, a fase gasosa pode ser resolvida analiticamente e a evolução da gota integrada no tempo. Essa é a base para os modelos apresentados na Seção 2.2.1.

Diferentes abordagem existem para considerar o interior da partícula. Algumas são discutidas na Seção 2.2.2.

2.2.1 Modelos com Interior de Gota Homogêneo

2.2.2 Modelos para o Interior da Gota

2.3 Modelos de Combustão de Gota Isolada (MCGI)

2.3.1 Modelos de Modo de Combustão de Gotas

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, 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>.