



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

LEONARDO COELHO RAMALHO TEIXEIRA

**ADAPTAÇÃO DO MODELO DE COMBUSTÃO TURBULENTA DO REATOR
PARCIALMENTE AGITADO EM SIMULAÇÃO MULTIDIMENSIONAL DE UM
MOTOR DIESEL**

FORTALEZA

Dezembro-2018

LEONARDO COELHO RAMALHO TEIXEIRA

ADAPTAÇÃO DO MODELO DE COMBUSTÃO TURBULENTA DO REATOR
PARCIALMENTE AGITADO EM SIMULAÇÃO MULTIDIMENSIONAL DE UM MOTOR
DIESEL

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao
Curso de Graduação em Engenharia Mecânica
do Centro de Tecnologia da Universidade
Federal do Ceará, como requisito parcial à
obtenção do título de Engenheiro Mecânico.

Orientador: Prof. Dr. André Valente Bu-
eno

FORTALEZA

Dezembro-2018

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

T267a Teixeira, Leonardo Coelho Ramalho.

Adaptação do modelo de combustão turbulenta do reator parcialmente agitado em simulação multidimensional de um motor diesel / Leonardo Coelho Ramalho Teixeira. – 2018.
99 f. : il. color.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia, Curso de Engenharia Mecânica, Fortaleza, 2018.
Orientação: Prof. Dr. André Valente Bueno.

1. Combustão. 2. Micro-algoritmo genético. 3. Reator parcialmente agitado. 4. Turbulência. I. Título.
CDD 620.1

LEONARDO COELHO RAMALHO TEIXEIRA

ADAPTAÇÃO DO MODELO DE COMBUSTÃO TURBULENTA DO REATOR
PARCIALMENTE AGITADO EM SIMULAÇÃO MULTIDIMENSIONAL DE UM MOTOR
DIESEL

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao
Curso de Graduação em Engenharia Mecânica
do Centro de Tecnologia da Universidade
Federal do Ceará, como requisito parcial à
obtenção do título de Engenheiro Mecânico.

Aprovada em:

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. André Valente Bueno (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Paulo Alexandre Costa Rocha
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof^a. Dr^a. Maria Alexsandra de Sousa Rios
Universidade Federal do Ceará (UFC)

À minha família, por sua capacidade de acreditar
em mim.

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Nivaldo e Cláudia, pelo amor incondicional demonstrado a mim ao longo da vida.

À minha irmã Marina, por sua amizade e por ter sido sempre um exemplo de determinação.

À Mariana Biermann, por ter sido incrivelmente parceira e ter me proporcionado momentos de alegria e tranquilidade ao longo dos últimos anos.

Ao Professor André Bueno, por toda a orientação dada no decorrer da graduação, por ter sido um exemplo de engenheiro mecânico e pelo apoio nos diversos momentos de desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus amigos: Yago, Josfran, Davi, Rodolfo, Cantal, Pedro, Matheus, Coquim, Igor, Larissa, Álvaro, Leo, Victor e Carlos, por dividirem a vida comigo desde o colégio.

Aos amigos que a faculdade me proporcionou: Daniel, Rodolfo, Jean, Samyo, Brad, Magro, JV, Kevin, Gazelli, Jefferson, Victor, Calebe, Ítalo, Mônica, Cairo e Baiano. Por todos os postos, Sateroots, traillers e momentos de descontração ao longo da graduação.

Aos amigos do CsF: PG, Lucas, Gabriel, Ana, Stephanie, Bruna, Felipe, Bruno, Otávio, Fredão, Carioca e Sub. Por dividirem comigo a experiência de um intercâmbio.

A toda a equipe da Torus engenharia, pela experiência profissional incrível que me é proporcionada.

E a todos os outros que participaram da minha vida, das mais diversas maneiras nos últimos anos.

“Improvise, adapte-se e supere”

(Bear Grylls)

RESUMO

A abordagem numérica da solução das equações de Navier-Stokes pela média de Reynolds (RANS), devido a seu baixo custo computacional, é a mais utilizada em simulações de Dinâmica dos Fluidos Computacional. Porém, na análise de escoamentos turbulentos reativos, a utilização dessa abordagem deve ser atrelada a um método capaz de determinar as taxas de variação de concentração das espécies químicas presentes no processo de combustão. Modelos de combustão turbulenta surgem como um modo para determinar os valores de tais taxas, entretanto, sua implementação deve ser validada a partir de dados experimentais. Este estudo propõe a análise dos efeitos da aplicação de uma versão adaptada do modelo de combustão turbulenta PaSR, a partir de sua implementação no *software* KIVA-3V, em simulações multidimensionais de um motor diesel. As adaptações realizadas buscam obter maior controle sobre a influência da turbulência no progresso das reações químicas. Os resultados foram comparados aos obtidos em uma simulação que utiliza um modelo que negligencia os efeitos da turbulência sobre a cinética química. Além disso, utilizou-se um micro-algoritmo genético, desenvolvido na linguagem PYTHON, para gerar simulações com parâmetros de entrada variáveis, com o intuito de ajustar os valores de dois termos presentes no modelo adaptado. O mesmo algoritmo também é utilizado como ferramenta de otimização e deve ter sua capacidade de realizar tal tarefa avaliada. Os resultados mostram que o modelo implementado foi capaz de descrever a fase pré-misturada da combustão de maneira próxima aos dados obtidos experimentalmente, freando as taxas de liberação de energia nesse período e obtendo um pico apenas 13% maior que o experimental. Entretanto, na fase difusiva, a qual mostra menor influência da turbulência sobre o progresso das reações, os resultados obtidos pelos dois modelos se mostraram similares, ambos sub-representam a liberação de energia experimental. O micro-algoritmo implementado foi capaz de obter resultados satisfatórios e mostrou funcionar conforme esperado. Entretanto, o funcionamento do algoritmo não caracterizou um processo de otimização, uma vez que o melhor resultado obtido surgiu logo ao início do processo e não foi possível realizar um maior número de simulações.

Palavras-chave: Combustão. Micro-algoritmo genético. Reator parcialmente agitado. Turbulência.

ABSTRACT

The RANS numerical models, due to its low computational cost, are the most commonly used in Computational Fluid Dynamics simulations. However, in the analysis of reactive turbulent flows, the use of this approach must be linked to a method capable of determining the concentration variation rates of the chemical species present in the combustion process. Turbulent combustion models arise as a way to determine the values of such rates, however, their implementation must be validated with experimental data. This study proposes the analysis of the effects of the application of an adapted version of the turbulent combustion model PaSR in multidimensional simulations of a diesel engine. The adaptations seek to obtain greater control over the influence of turbulence in the progress of the chemical reactions. The results should be compared to those obtained in a simulation using a model that neglects the effects of turbulence on chemical kinetics. In addition, a micro-genetic algorithm, developed in PYTHON, is used to generate simulations with variable input parameters, in order to adjust the values of two terms present in the adapted model. The same algorithm is also used as an optimization tool and should have its ability to perform such an evaluated task. The results show that the implemented model was able to describe the premixed combustion phase in a way close to the experimental data, slowing down the energy release rates in that period and obtaining a peak only 13% greater than the experimental one. However, in the diffusive phase, which shows less influence of the turbulence on the progress of the reactions, the results obtained by the two models were similar, both sub-represent the experimental energy release, the implemented micro-algorithm was able to obtain satisfactory results and showed to function as expected. However, the operation of the algorithm did not characterize an optimization process, since the best result obtained appeared at the beginning of the process and it was not possible to perform a greater number of simulations.

Palavras-chave: Combustion. Micro-genetic algorithm. Partially stirred reactor. Turbulence.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Ilustração de pistão e mecanismo biela-manivela.	19
Figura 2 – Fases do ciclo de funcionamento de um motor de quatro tempos	20
Figura 3 – Fluxograma do processo de combustão em motores Diesel	21
Figura 4 – Fotografias em alta velocidade do processo de injeção de combustível.	23
Figura 5 – Esquema de spray em ambiente com <i>swirl</i>	23
Figura 6 – Ilustração dos regimes de quebra.	24
Figura 7 – Ilustração das quebras primária e secundária.	25
Figura 8 – Esquema do modelo <i>Blob</i>	25
Figura 9 – Esquema do modelo <i>Blob-KH/RT</i>	26
Figura 10 – Ilustração da variação de parâmetros relacionados à evaporação em função do tempo após a injeção	28
Figura 11 – Esquema do processo de evaporação de gota de combustível monocomponente	28
Figura 12 – Progresso das reações de combustão em um motor diesel	29
Figura 13 – Exemplo de medição de velocidade em função do tempo em um escoamento turbulento	33
Figura 14 – Transição de escoamento laminar para turbulento	34
Figura 15 – Representação de vórtices turbulentos de dimensão l e velocidade u , em um escoamento de velocidade U e camada limite com espessura δ	35
Figura 16 – Ilustração das 3 sub-regiões do escoamento turbulento com altos valores de Re	38
Figura 17 – Grau de utilização de modelagem nos métodos de simulação de escoamento turbulento em função da carga computacional requirida pelos mesmos.	39
Figura 18 – Exemplo de decomposição de Reynolds de uma propriedade V_i de um escoamento turbulento.	41
Figura 19 – Exemplo de célula computacional segundo o modelo PaSR	49
Figura 20 – Ilustração das concentrações ao longo da reação de acordo com o modelo PaSR	50
Figura 21 – Fluxograma especificando diversas técnicas de busca.	52
Figura 22 – Funcionamento de um μ -AG.	54
Figura 23 – Exemplo de representação binária.	55
Figura 24 – Ilustração do método de seleção por torneio	57
Figura 25 – Esquema da aplicação do operador <i>crossover</i>	58
Figura 26 – Geometria da câmara de combustão do motor MWM Sprint 6.07T	60

Figura 27 – Ilustração da malha utilizada.	63
Figura 28 – Curvas de taxa liberação de energia em função do ângulo de manivela. . . .	69
Figura 29 – Histograma da distribuição geral de indivíduos	70
Figura 30 – Presença do indivíduo convergido na Geração 1 em suas populações.	72
Figura 31 – Ilustração da convergência dos parâmetros de entrada e do <i>fitness</i> na Geração 1	73
Figura 32 – Presença do indivíduo convergido na Geração 2 em suas populações.	74
Figura 33 – Ilustração da convergência dos parâmetros de entrada e do <i>fitness</i> na Geração 2	74
Figura 34 – Presença do indivíduo convergido na Geração 3 em suas populações.	76
Figura 35 – Ilustração da convergência dos parâmetros de entrada e do <i>fitness</i> na Geração 3	76
Figura 36 – Comparação dos resultados obtidos através do $\mu - AG$	77
Figura 37 – Curvas das taxas de liberação de energia: simulações e experimental	78
Figura 38 – Curvas de pressão no interior do cilindro: simulações e experimental	78

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Dados técnicos do motor MWM Sprint 6.07T	60
Tabela 2 – Modelos adotados no <i>software</i> Kiva-3V	62
Tabela 3 – Condições de contorno das simulações.	63
Tabela 4 – Parâmetros de entrada do micro-algoritmo genético ($\mu - AG$).	67
Tabela 5 – Quantidade de bits necessária para descrever os parâmetros de entrada . . .	67
Tabela 6 – Distribuição geral de indivíduos.	71
Tabela 7 – Distribuição de indivíduos na Geração 1.	72
Tabela 8 – Parâmetros dos indivíduos convergidos e mais bem avaliados na Geração 1.	72
Tabela 9 – Distribuição de indivíduos na Geração 2.	73
Tabela 10 – Parâmetros do indivíduo convergido na Geração 2.	74
Tabela 11 – Distribuição de indivíduos na Geração 3.	75
Tabela 12 – Parâmetros dos indivíduos convergido e mais bem avaliado na Geração 3. .	75

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AG	Algoritmos genéticos
$\mu - AG$	micro-algoritmo genético
CTCM	<i>Characteristic Time Combustion Model</i>
EGR	Recirculação dos Gases de Exaustão
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
PSR	<i>Perfectly Stirred Reactor</i>
PaSR	<i>Partially Stirred Reactor</i>
RANS	Navier-Stokes com médias de Reynolds
CA1INJ	ângulo de injeção de combustível
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
COMBKK	Multiplicador tempo turbulento
COMBKN	Expoente do fator de atraso
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
KH	Kelvin-Helmholtz
LMCI	Laboratório de Motores de Combustão Interna da Universidade Federal do Ceará
NO _x	óxidos de nitrogênio
PMI	ponto morto inferior
PMS	ponto morto superior
RT	Rayleigh-Taylor

LISTA DE SÍMBOLOS

d_{es}	Taxa de destruição de uma espécie
c_k	Concentração da espécie k
C_{mix}	Multiplicador do tempo turbulento
C_{kn}	Expoente do fator de atraso
Da	Número de Damköhler
f	Fator de atraso
g_{er}	Taxa de geração de uma espécie
k	energia cinética turbulenta
k_{fi}	constante de velocidade no sentido direto da reação i
k_{ri}	constante de velocidade no sentido reverso da reação i
L	Comprimento característico do escoamento
L_0	Comprimento dos grandes vórtices
l_{EI}	Escala de comprimento que separa vórtices de acordo com a isotropia
l_{DI}	Escala de comprimento discriminante de pequenos vórtices e vórtices dissipativos
p	Pressão
r	Índice de completude da combustão
R^2	Coefficiente de determinação de Pearson
Re	Número de Reynolds
RR_j	Taxa de reação da espécie j
u_j	Velocidade na direção j
u_0	Velocidade dos grandes vórtices
u_η	Escala de velocidade de Kolmogorov
We	Número de Weber
X_{sup}	Limite superior da faixa de atuação de um parâmetro
X_{inf}	Limite inferior da faixa de atuação de um parâmetro
Y_i	Fração Mássica da espécie i

$\delta_{i,j}$	Delta de Kronecker
ε	Taxa média de dissipação de energia turbulenta
η	Escala dimensional de Kolmogorov
ϕ	Razão de equivalência
λ	Quantidade de <i>bits</i> utilizada na representação do parâmetro
μ	Viscosidade dinâmica
μ_t	Viscosidade turbulenta
ν	Viscosidade cinemática
ν'_j	Coefficiente estequiométrico da espécie <i>j</i> como reagente
ν''_j	Coefficiente estequiométrico da espécie <i>j</i> como produto
π	Precisão da representação do parâmetro
ρ	Densidade
τ_0	Escala característica de tempo dos grandes vórtices
τ_η	Escala característica de tempo de Kolmogorov
τ_{chem}	Escala característica de tempo das reações químicas
τ_l	Escala de tempo característica de conversão laminar
τ_{mix}	Escala de tempo característica de mistura turbulenta
τ_{ij}	Tensão de cisalhamento oriunda da viscosidade
τ_{ijt}	Tensão de Reynolds
$\dot{\omega}_k$	Taxa de variação de concentração da espécie <i>k</i>

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	16
2	OBJETIVOS	18
2.1	Objetivo geral	18
2.2	Objetivos específicos	18
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	19
3.1	Funcionamento de um motor diesel	19
3.1.1	<i>Processo de combustão por injeção direta</i>	21
3.1.1.1	<i>Injeção de combustível</i>	22
3.1.1.2	<i>Quebra de gotas</i>	23
3.1.1.3	<i>Evaporação</i>	26
3.1.1.4	<i>Auto-ignição</i>	28
3.1.1.5	<i>Fases da combustão no ciclo diesel</i>	29
3.1.1.6	<i>Cinética Química</i>	30
3.1.1.7	<i>Modelo de Arrhenius</i>	31
3.2	Turbulência	32
3.2.1	<i>Caracterização da turbulência</i>	32
3.2.2	<i>Cascata de energia</i>	34
3.2.3	<i>Hipóteses de Kolmogorov</i>	35
3.2.4	<i>Modelagem matemática da turbulência</i>	37
3.2.4.1	<i>Equações de Conservação</i>	39
3.2.4.2	<i>Abordagem RANS</i>	40
3.2.4.3	<i>Modelo $k - \epsilon$</i>	43
3.3	Combustão turbulenta	44
3.3.1	<i>Equação de conservação da massa para uma espécie A</i>	45
3.3.2	<i>Abordagem RANS em escoamentos reativos</i>	45
3.3.3	<i>Modelagem da combustão turbulenta</i>	46
3.3.3.1	<i>Modelo de tempos característicos</i>	46
3.3.3.2	<i>Modelo do Reator Parcialmente Agitado - PaSR</i>	48
3.4	Algoritmos genéticos	51
3.4.1	<i>Micro-Algoritmo Genético</i>	53

3.4.1.1	<i>Codificação</i>	54
3.4.1.2	<i>Função de avaliação</i>	56
3.4.1.3	<i>Reprodução</i>	56
3.4.1.4	<i>Convergência e encerramento</i>	58
4	METODOLOGIA	60
4.1	Informações do motor estudado	60
4.2	Simulação numérica do escoamento reativo	61
4.2.1	<i>O software Kiva-3V</i>	61
4.2.2	<i>Geração e convergência de malha</i>	62
4.2.3	<i>Condições iniciais e de contorno</i>	63
4.3	Adaptações no modelo PaSR	63
4.4	Implementação do Micro-algoritmo genético	65
4.4.1	<i>Entrada dos parâmetros e Codificação</i>	66
4.4.2	<i>Função de avaliação</i>	67
4.4.3	<i>Reprodução</i>	68
4.4.4	<i>Encerramento</i>	68
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	69
5.1	Validação da Função de Avaliação Seleccionada	69
5.2	Desempenho Geral do Micro-Algoritmo Genético	70
5.2.1	<i>Geração 1</i>	71
5.2.2	<i>Geração 2</i>	72
5.2.3	<i>Geração 3</i>	74
5.2.4	<i>Comparação de resultados do $\mu - AG$</i>	76
5.3	Curvas da taxa de liberação de energia e de pressão no interior do cilindro	77
6	CONCLUSÃO	81
	REFERÊNCIAS	82
	APÊNDICES	86
	APÊNDICE A – Subrotina da implementação do modelo PaSR no <i>software</i> KIVA-3V	86
	APÊNDICE B – Código fonte do algoritmo genético - Arquivo <i>MUGA.py</i>	91
	APÊNDICE C – Código fonte do algoritmo genético - Arquivo <i>MUGAFIT.py</i>	93
	APÊNDICE D – Código fonte do algoritmo genético - Arquivo <i>MUGALIB.py</i>	95

1 INTRODUÇÃO

Atualmente, motores movidos a combustão a diesel são fonte primária de energia para diversas aplicações cotidianas, as quais vão desde pequenos veículos de passeio a grandes máquinas industriais. Entretanto, o processo de queima deste combustível resulta na emissão de elementos como fuligem e óxidos de nitrogênio (NO_x), os quais são danosos tanto ao ambiente quanto ao ser humano. Devido à grande aplicabilidade deste tipo de motor, ele é considerado um dos grandes contribuidores da crescente poluição global. Com a intenção de controlar este problema, as regulamentações sobre as emissões de motores a diesel estão se tornando cada vez mais restritas, ao ponto que, caso não passem por um processo de adaptação, tais máquinas podem se tornar obsoletas.

Com o intuito de compreender melhor o processo de combustão e, por consequência, o processo de formação de emissões, testes experimentais com motores são constantemente realizados. Entretanto, realizar tais testes, muitas vezes, apresenta-se como um processo caro e demorado. Nordin (2001) compara um motor em funcionamento a uma caixa preta, uma vez que os parâmetros de entrada e saída são conhecidos, mas não se têm muitas informações sobre os processos internos.

Com o advento de computadores cada vez mais potentes, a utilização de simulações baseadas em dinâmica dos fluidos computacional, ou *Computational Fluid Dynamics* (CFD), tem se mostrado como uma ferramenta eficiente para obter informações mais precisas sobre o processo de combustão. Tais simulações permitem uma redução considerável no tempo e nos custos envolvidos no processo de análise de motores. Contudo, é importante pontuar que, apesar de representarem com fidedignidade os casos analisados na maior parte das vezes, simulações computacionais devem ser sempre validadas com dados experimentais.

O processo de combustão em motores diesel é bastante complexo, uma vez que combina problemas de escoamentos multifásicos, turbulência e cinética química. É válido ressaltar que muitas das escalas de tempo envolvidas com esses problemas são demasiadamente pequenas, o que aumenta sua dificuldade de resolução. Isso posto, não deve causar surpresa o fato de simulações multidimensionais de escoamentos reativos serem processos com carga computacional extremamente elevada. A maior parte de tais simulações são baseadas na abordagem da solução das equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds (*RANS*), pois esse método tem se mostrado capaz de obter soluções satisfatórias a partir de uma carga computacional relativamente baixa. Entretanto, a aplicação dos métodos *RANS* em escoamentos reativos dá

origem ao chamado problema da combustão em ambiente turbulento, o qual está relacionado às taxas médias de variação de concentração das espécies químicas ($\tilde{\omega}_k$). Devido a sua alta não-linearidade, tais taxas não são facilmente determinadas. Com efeito, segundo Glassman *et al.* (2015), ao levar em consideração o efeito das reações químicas em estudos de CFD, é necessário tratar cada uma das espécies individualmente, pois suas concentrações locais influenciam no progresso das reações. Desse modo, torna-se necessária a determinação do termo $\tilde{\omega}_k$ para cada uma das espécies químicas presentes no processo.

Visando a solucionar o problema da combustão em ambientes turbulentos, com o intuito de facilitar a determinação das taxas de variação das concentrações, foram desenvolvidos diversos modelos que avaliam os efeitos da turbulência sobre as reações químicas. O modelo aplicado neste estudo é uma adaptação do modelo do reator parcialmente agitado, do inglês *Partially Stirred Reactor (PaSR)*, o qual foi desenvolvido por Golovitchev *et al.* (2000). As adaptações realizadas ao modelo têm a finalidade de garantir um maior controle sobre as escalas de tempo características atreladas à turbulência. O modelo foi implementado no *software* de simulação de escoamentos turbulentos, multifásicos e reativos KIVA-3V.

Para a adequada implementação do modelo, alguns parâmetros que não apresentam seus valores especificados na literatura necessitam de ajuste. Tais parâmetros são o multiplicador da escala de tempo turbulento e o expoente do fator de atraso. Para realizar tal ajuste, um $\mu - AG$ foi implementado, tendo como base o trabalho de Senecal (2000). O mesmo algoritmo é utilizado para tentar alcançar uma otimização em geral do modelo.

Para tanto, o objetivo deste foi analisar a aplicação do modelo *PaSR* em uma simulação multidimensional do processo de combustão de um motor diesel, de modo a avaliar a capacidade do modelo em descrever as diversas fases da combustão. O modelo será validado a partir de dados experimentais fornecidos pelo Laboratório de Motores de Combustão Interna da Universidade Federal do Ceará (LMCI). Deve-se utilizar o $\mu - AG$ para gerar diversas simulações com parâmetros de entrada variados. Além disso, deve-se, também, avaliar se o $\mu - AG$ implementado é, de fato, efetivo como ferramenta de otimização do modelo *PaSR* no caso analisado. Por fim, o modelo deverá ser comparado a dados obtidos a partir da simulação do mesmo escoamento, porém utilizando um outro modelo de combustão turbulenta, no qual negligenciam-se os efeitos da turbulência sobre as reações.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo geral

Analisar os efeitos da aplicação do modelo de combustão turbulenta *PaSR* em uma simulação multidimensional de um motor diesel, verificando sua capacidade em descrever as fases do progresso da combustão.

2.2 Objetivos específicos

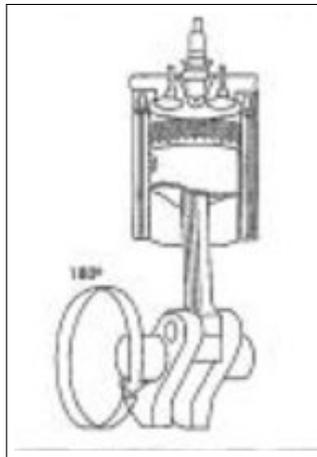
- Utilizar um micro-algoritmo genético para gerar diversas simulações com parâmetros de entrada variáveis e verificar sua efetividade como ferramenta de otimização;
- Comparar os resultados obtidos a partir da implementação do modelo, com os resultados obtidos a partir da simulação com o modelo de combustão que não leva em consideração os efeitos da turbulência sobre as reações.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1 Funcionamento de um motor diesel

Motores são máquinas térmicas, ou seja, são elementos capazes de transformar calor em trabalho. A fonte de calor de um motor é a queima de uma mistura de ar e combustível formada em seu interior. A queima dessa mistura libera energia suficiente para movimentar um pistão, o qual gera movimento rotativo a partir de um mecanismo biela-manivela, como ilustra a Figura 1.

Figura 1 – Ilustração de pistão e mecanismo biela-manivela.



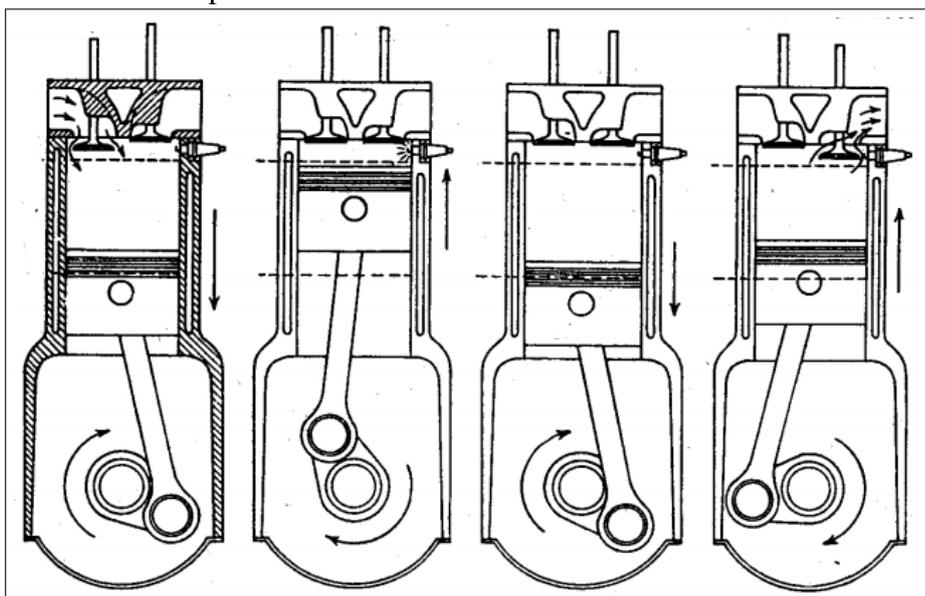
Fonte: Brunetti (2012)

Motores diesel também são conhecidos como motores de compressão, pois, durante seu funcionamento, o pistão comprime apenas ar, até que uma temperatura suficientemente elevada seja atingida. O combustível é injetado apenas quando o pistão se aproxima do ponto morto superior (PMS), por tal motivo, esse tipo de motor também recebe o nome de motor de injeção direta. O combustível injetado se mistura com o ar aspirado pelo motor formando uma mistura homogênea. Tal mistura pode ser caracterizada como rica ou pobre baseado em sua razão de equivalência (ϕ). Esse parâmetro relaciona a razão entre ar e combustível da mistura formada com a razão estequiométrica. Caso a razão seja maior que a estequiométrica a mistura é considerada rica, isto é, possui excesso de combustível. Caso a razão seja menor que a estequiométrica, tem-se excesso de ar e a mistura é considerada pobre. Essa relação é ilustrada na Equação 3.1.

$$\phi = \frac{\text{Razão ar-combustível}}{\text{Razão estequiométrica}} \quad (3.1)$$

Motores também podem ser classificados de acordo com o número de etapas necessárias para concluir um ciclo de funcionamento. Os que encerram seu ciclo em apenas uma volta completa do eixo de manivelas são denominados motores de dois tempos, já os que só encerram o processo após duas voltas de tal eixo são chamados de motores de quatro tempos. Visto isso, motores de quatro tempos, como é o caso analisado neste estudo, podem ter seu funcionamento dividido em quatro etapas: admissão, compressão, expansão e exaustão. A etapa de admissão corresponde aos primeiros 180° da volta do eixo. Nessa etapa, ar é admitido para o interior do cilindro a partir da abertura da válvula de admissão. Esse processo se estende até o fechamento de tal válvula, quando o pistão já se encontra próximo do ponto morto inferior (PMI). Após o pistão atingir seu ponto mais baixo, dá-se início ao ciclo de compressão. Nesse ciclo, conforme mencionado, o ar é comprimido e o combustível é injetado. Ao atingir certa temperatura, a mistura ar-combustível entra em processo de auto-ignição, o qual dá início à combustão. A energia liberada pela combustão eleva a pressão no interior do cilindro, fazendo o pistão se movimentar para baixo, iniciando o processo de expansão. A última etapa, correspondente ao ciclo de exaustão, tem início após o pistão atingir, pela segunda vez, o PMI. Nessa fase ocorre a abertura da válvula de exaustão, a partir da qual são expulsos os produtos formados na combustão (BRUNETTI, 2012). Todo o ciclo de funcionamento de um motor quatro tempos é ilustrado na Figura 2.

Figura 2 – Fases do ciclo de funcionamento de um motor de quatro tempos

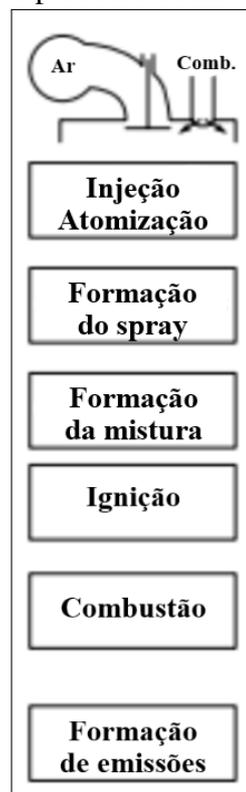


Fonte: Adaptado de Heywood (1988)

3.1.1 Processo de combustão por injeção direta

Segundo Merker *et al.* (2005), o processo de combustão em motores diesel pode ser caracterizado por uma sequência de eventos bem definidos, ilustrada na Figura 3. O primeiro é a injeção de combustível a alta pressão, na câmara de combustão, pouco tempo antes do pistão atingir o PMS, ou seja, próximo ao fim do ciclo de compressão. Em sequência, o combustível injetado forma diversas gotículas, tomando o formato de um *spray*, o qual é carregado junto ao ar aspirado para o cilindro durante o ciclo de admissão. O terceiro passo, é a evaporação das gotículas de combustível, formando uma mistura homogênea com o ar quente. Posteriormente, as altas temperatura e pressão na câmara de combustão causam a auto-ignição da mistura ar-combustível, dando início ao processo de combustão. O resultado desse processo é a formação de poluentes, como fuligem e NO_x , os quais são expulsos do interior do cilindro ao fim do ciclo de exaustão.

Figura 3 – Fluxograma do processo de combustão em motores Diesel



Fonte: Adaptado de Merker *et al.* (2005)

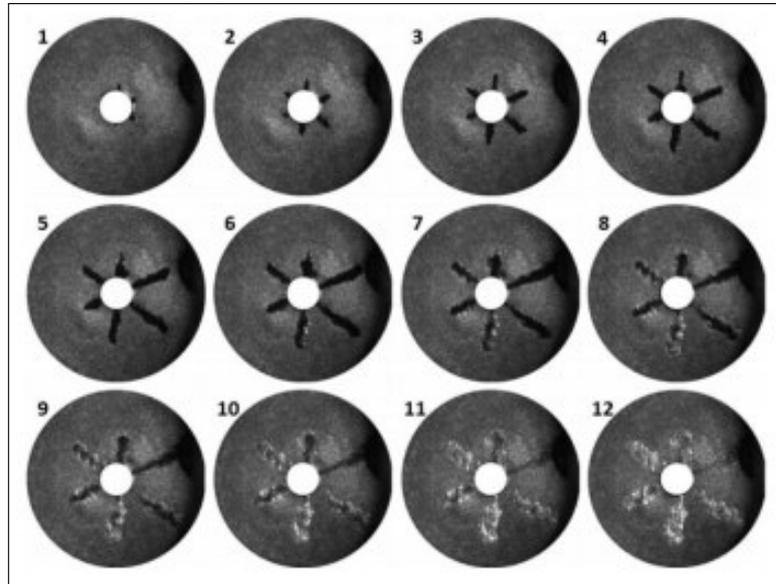
3.1.1.1 Injeção de combustível

O combustível é inserido na câmara de combustão através de um bico injetor localizado na região superior do cilindro. De acordo com Heywood (1988), o diesel deve ser injetado a uma pressão extremamente alta, geralmente entre 200 e 1700 atm, enquanto a pressão do cilindro se mantém no intervalo entre 50 e 100 atm. Essa diferença de pressão entre o diesel e o ar no cilindro é necessária para garantir que o combustível adentre a câmara de combustão a alta velocidade. Uma vantagem oriunda dessa alta velocidade de entrada é o favorecimento da atomização do combustível em gotículas, facilitando sua evaporação. A rápida velocidade também permite que o combustível percorra uma máxima distância dentro do cilindro no curto intervalo de tempo entre a injeção e o início da auto-ignição do combustível. O diâmetro dos orifícios presentes no bico injetor varia entre 0,2 e 1 mm e o número de orifícios varia de acordo com o modelo de bico.

A Figura 4 mostra uma sequência de fotografias tiradas em alta velocidade do momento da injeção de combustível. O jato toma formato cônico, o qual permite que a distância entre as gotículas aumente com sua penetração no interior do cilindro. O combustível na região próxima ao orifício injetor se encontra em estado majoritariamente líquido, caracterizando uma região mais densa. A densidade é então, sequencialmente, reduzida com o aumento da presença de ar no interior do *spray*. As gotículas na região externa do jato são as primeiras a evaporar, de modo que se cria uma camada de mistura ar-combustível homogênea, a qual envolve o interior líquido do jato. É válido ressaltar que um *spray* completamente desenvolvido tem sua maior parte composta pela camada de vapor ao redor do líquido.

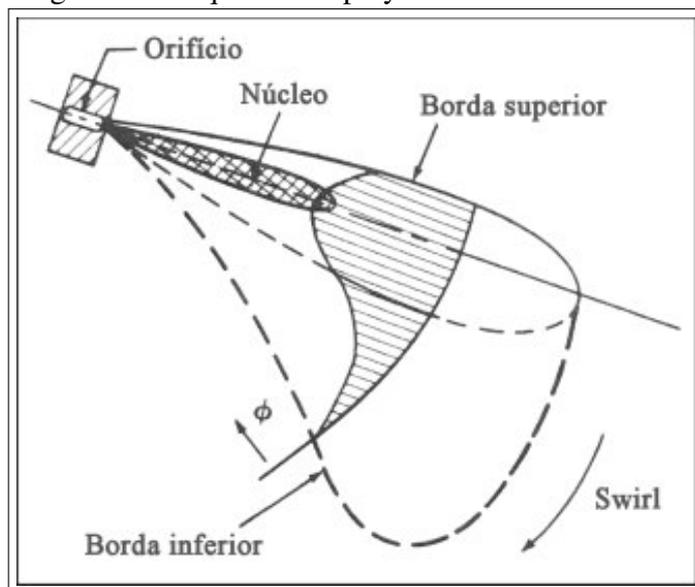
Algumas câmaras de combustão utilizam a geometria dos dutos do cabeçote para provocar um movimento rotativo no ar aspirado para o cilindro. Tal fenômeno é denominado de *swirl* e é utilizado para intensificar a mistura entre combustível e ar. Ao se realizar uma injeção de combustível em um ambiente com *swirl*, a estrutura do jato se torna mais complexa pois existe movimento relativo entre o ar e o combustível nas direções radial e tangencial. A Figura 5 mostra um esquema ilustrando a injeção em um ambiente com *swirl*, no qual pode-se observar a distribuição da razão de equivalência (ϕ) (HEYWOOD, 1988).

Figura 4 – Fotografias em alta velocidade do processo de injeção de combustível.



Fonte: Salaun *et al.* (2016)

Figura 5 – Esquema de spray em ambiente com *swirl*.



Fonte: Adaptado de Heywood (1988)

3.1.1.2 Quebra de gotas

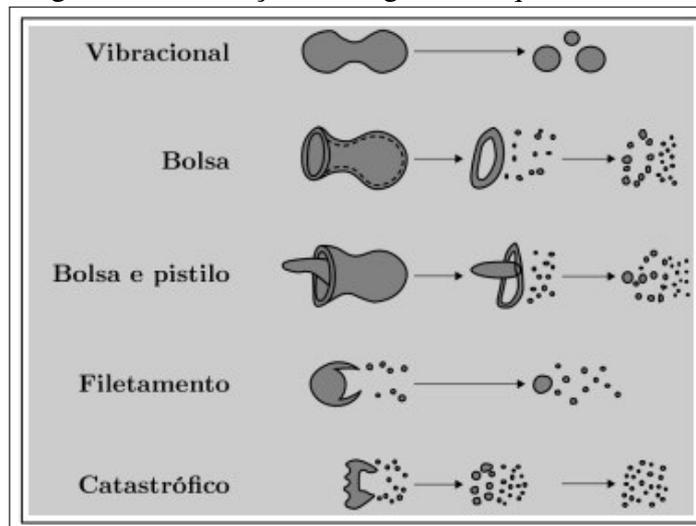
Ao deixar o orifício injetor, o combustível se encontra na forma de um jato líquido contínuo, portanto, torna-se necessária a utilização de modelos que reproduzam a quebra do *spray* em gotículas. Devido à grande diferença de pressão entre o combustível injetado e o ar presente no cilindro, o processo de dissolução da fase contínua se dá de maneira quase instantânea (STIESCH, 2003).

Segundo Baumgarten (2006), a formação de gotículas de combustível ocorre a partir

da atuação das forças aerodinâmicas induzidas pela velocidade relativa entre o combustível injetado e o ar presente no cilindro. Dessa forma, para analisar este fenômeno, torna-se necessária a introdução de um parâmetro conhecido como número de Weber (We). Este parâmetro quantifica a relação entre as forças aerodinâmicas e as forças relacionadas à tensão superficial do combustível. O número de Weber permite a classificação de diversos tipos de quebra e pode ser determinado conforme a Equação 3.2, na qual ρ_g é a densidade do ar, u_{rel} é a velocidade relativa entre o combustível líquido e o ar, D é o diâmetro do orifício injetor e σ_s representa a tensão superficial entre o líquido e o ar. Wierzba (1990), classifica a quebra em 5 regimes correspondentes a diferentes intervalos de We : Vibracional ($We \approx 12$); Bolsa ($12 < We < 20$); Bolsa-pistilo ($20 < We < 50$); Filetamento ($50 < We < 100$) e Catastrófico ($We > 100$). Os tipos de quebra estão ilustrados na Figura 6, a partir da qual pode-se observar que quanto maior o valor do número de Weber, mais abrupta é a quebra.

$$We = \frac{\rho_g \cdot u_{rel}^2 \cdot D}{\sigma_s} \quad (3.2)$$

Figura 6 – Ilustração dos regimes de quebra.

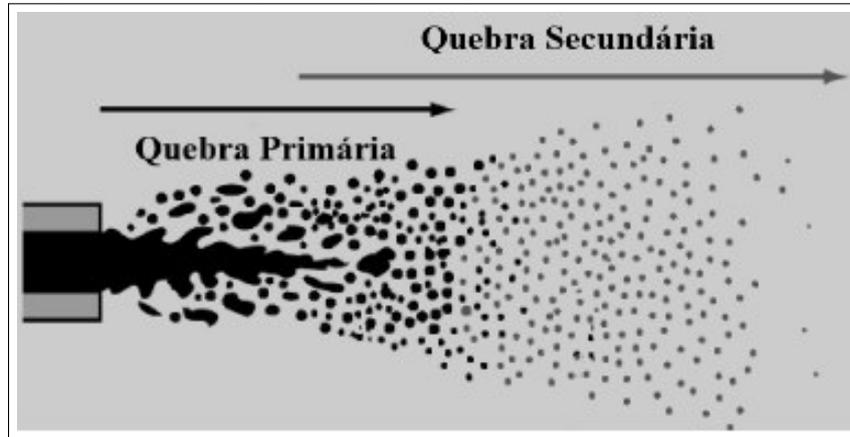


Fonte: Adaptado de Lefebvre e McDonell (2017)

Considera-se que o processo de quebra é realizado em duas partes: Quebra primária e secundária, as quais são ilustradas na Figura 7. A parte inicial diz respeito a transformação do jato líquido contínuo em gotas de tamanho aproximado ao diâmetro do bico injetor e ocorre a altos valores de We . Essa etapa não depende apenas das relações entre o combustível líquido e o ar, pois também está relacionada a fenômenos que ocorrem dentro do injetor, como turbulência e cavitação. A quebra secundária ocorre mais distante do ponto de injeção e é caracterizada pela

quebra das gotas oriundas do processo anterior em gotículas menores, por meio das interações aerodinâmicas.

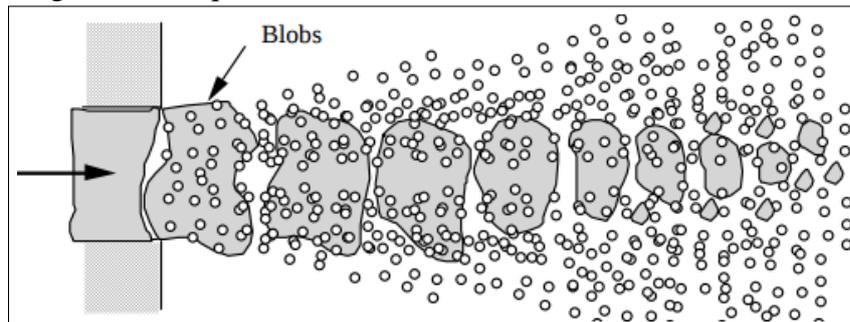
Figura 7 – Ilustração das quebras primária e secundária.



Fonte: Adaptado de Solanki *et al.* (2013)

O modelo *Blob*, desenvolvido por Reitz e Diwakar (1986), foi utilizado neste estudo para a representação da quebra primária. Esse modelo, representado na Figura 8, considera que a injeção contínua de combustível pode ser substituída pela injeção constante de grandes gotas esféricas, conhecidas como *blobs*, as quais possuem diâmetro na mesma ordem de grandeza do diâmetro do orifício injetor. Uma das vantagens deste modelo é a baixa quantidade de entradas requeridas para sua implementação.

Figura 8 – Esquema do modelo *Blob*.



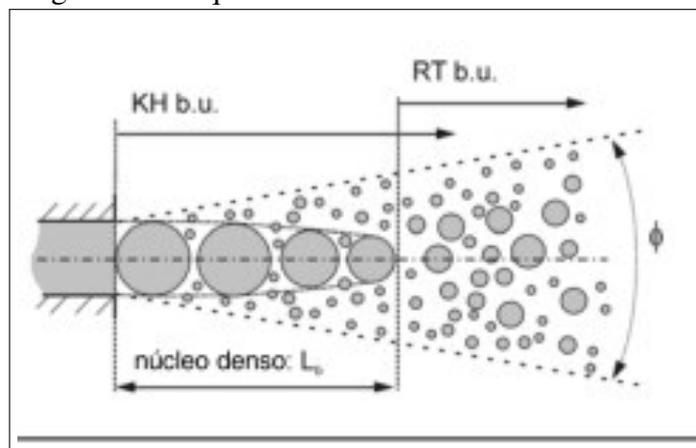
Fonte: Reitz (1996)

Segundo Baumgarten (2006), dentre os diversos modelos desenvolvidos para a quebra secundária, dois se destacam: O modelo Kelvin-Helmholtz (KH) e o Rayleigh-Taylor (RT). O modelo KH se baseia na presença de instabilidades na superfície das gotas, as quais possibilitam o desprendimento de gotas menores. Essas gotas menores possuem diâmetro na ordem do comprimento de onda da instabilidade que a gerou. Já o modelo RT é fundamentado na hipótese de que as forças aerodinâmicas causam oscilações na superfície das gotas. Tais

perturbações têm o comprimento de onda aumentado ao longo da trajetória da partícula, até alcançar um valor crítico, o qual, ao ser atingido, permite a divisão da gota em parcelas menores. Normalmente, as gotas desenvolvidas pelo modelo RT possuem dimensões maiores que as reproduzidas pelo modelo KH.

Os três modelos citados podem ser combinados para originar um modelo único capaz de descrever todo o processo de quebra de gotas. Nesta combinação, denominada de modelo Blob-KH/RT, diversos *blobs* são injetados, os quais, a partir da ação de forças aerodinâmicas, são desintegrados em partículas menores segundo apenas um dos modelos de quebra secundária, priorizando o que promover uma quebra mais rápida. Em aplicações numéricas, dá-se prioridade ao modelo RT. Caso ele não seja capaz de promover a quebra da gota dentro do intervalo de tempo estipulado para uma iteração, o método KH entra em ação. Além disso, certifica-se que o modelo Rayleigh-Taylor só tenha início após certa distância do ponto de injeção, visando a evitar uma quebra demasiadamente rápida. O modelo Blob-KH/RT, ilustrado pela Figura 9, já foi aplicado em diversos estudos, obtendo sucesso ao ser validado com dados experimentais. Entre suas vantagens estão a obtenção de uma maior quantidade de combustível evaporado e uma menor penetração do jato (BAUMGARTEN, 2006).

Figura 9 – Esquema do modelo *Blob-KH/RT*



Fonte: Adaptado de Baumgarten (2006)

3.1.1.3 Evaporação

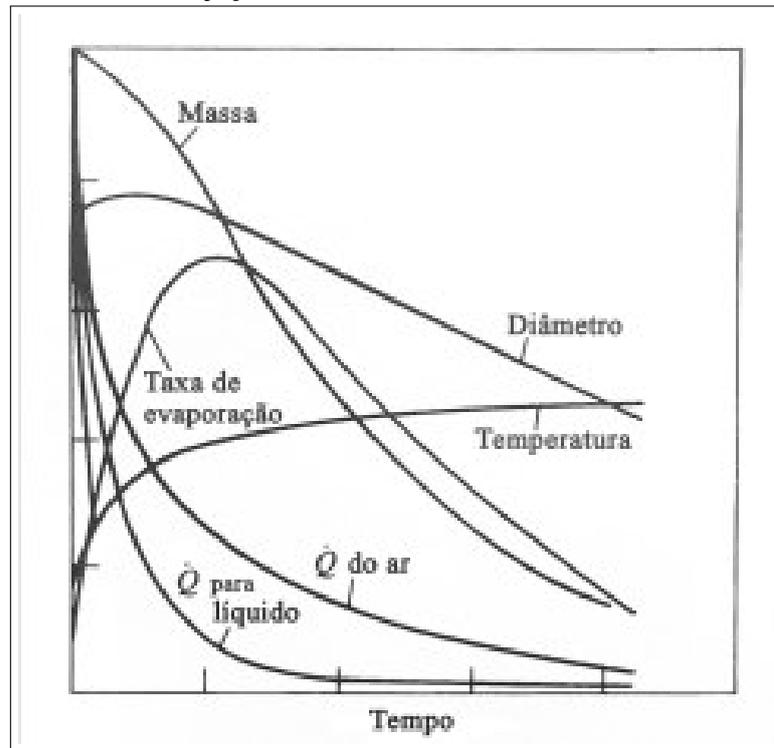
O processo de evaporação de combustível possui papel significativo para combustão, principalmente, em motores com injeção direta. Para formar uma mistura homogênea com o ar presente no cilindro, é necessário que o combustível seja vaporizado de modo a permitir que as

moléculas de combustível injetado reajam com o oxigênio presente no ar aspirado. Essa reação marca o início do processo de combustão. Ademais, a evaporação determina a distribuição espacial da razão ar-combustível, influenciando diretamente o momento e a posição da auto-ignição. Por fim, esse processo também está intrinsecamente relacionado a formação de emissões. Enquanto a não evaporação de parcelas de combustível favorece a formação de fuligem, uma evaporação demasiadamente rápida causa um aumento na formação de NO_x (STIESCH, 2003).

É importante pontuar que este processo é dependente da quebra de gotas, pois o combustível injetado, muitas vezes, encontra-se abaixo da sua temperatura de ebulição. A quebra em gotículas causa um aumento da área superficial, permitindo um aumento dos processos convectivos e difusivos. Segundo Heywood (1988), o processo evaporativo é dependente de três fenômenos. O primeiro é a desaceleração da gota devido ao arrasto do ar, influenciando os coeficientes convectivos. O fenômeno seguinte é a transmissão de calor do ambiente para o interior da gota, provocando um aumento na temperatura do combustível e, por consequência, aumentando a pressão de vapor. O terceiro é a transferência de massa da gota para o ambiente ao seu redor, o qual diminui a área superficial da gota, afetando a transmissão de calor para a gota. A Figura 10 ilustra as variações de massa, diâmetro, taxa de evaporação, temperatura e taxas de transmissão de calor em uma partícula relacionadas ao tempo após a injeção.

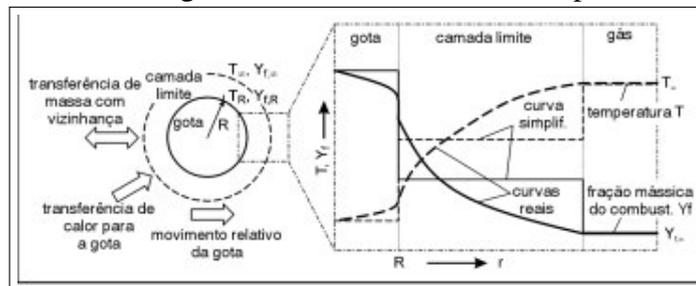
Combustíveis utilizados em aplicações reais, como é o caso do diesel, são compostos de múltiplos componentes. Espera-se que componentes diferentes reajam de maneira distinta ao processo de evaporação. Componentes mais voláteis, por exemplo, evaporam de maneira mais rápida. Tal fato afeta, diretamente, as propriedades da mistura homogênea necessária para iniciar processo de ignição. Entretanto, os cálculos atrelados à variação das propriedades de gotas compostas por vários componentes podem se apresentar extremamente complexos em alguns casos, ou seja, o custo computacional de simulações numéricas envolvendo esse processo evaporativo é elevado, podendo torná-lo pouco atraente. Visando a contornar este problema, é comum considerar a composição do combustível por apenas um único componente que seja capaz de representar bem as propriedades do combustível real. Essa abordagem é capaz de obter resultados satisfatórios com um custo computacional reduzido (BAUMGARTEN, 2006). O processo de evaporação de uma gota composta por apenas um componente está ilustrado na Figura 11.

Figura 10 – Ilustração da variação de parâmetros relacionados à evaporação em função do tempo após a injeção



Fonte: Adaptado de Heywood (1988)

Figura 11 – Esquema do processo de evaporação de gota de combustível monocomponente



Fonte: Adaptado de Baumgarten (2006)

3.1.1.4 Auto-ignição

A combustão em um motor diesel tem início quando a mistura ar-combustível atinge uma temperatura suficientemente elevada para entrar em processo de auto-ignição. Esse processo consiste em uma sequência de fenômenos físicos e químicos relativamente complexos.

Após a injeção de combustível, um determinado espaço de tempo, denominado atraso de ignição, se passa até o início da combustão. Esse intervalo dura cerca de 1 ms, podendo ser considerado demorado em relação aos demais processos da combustão. Esse atraso ocorre pois, para iniciar as reações químicas, é necessária a formação de radicais livres a partir de

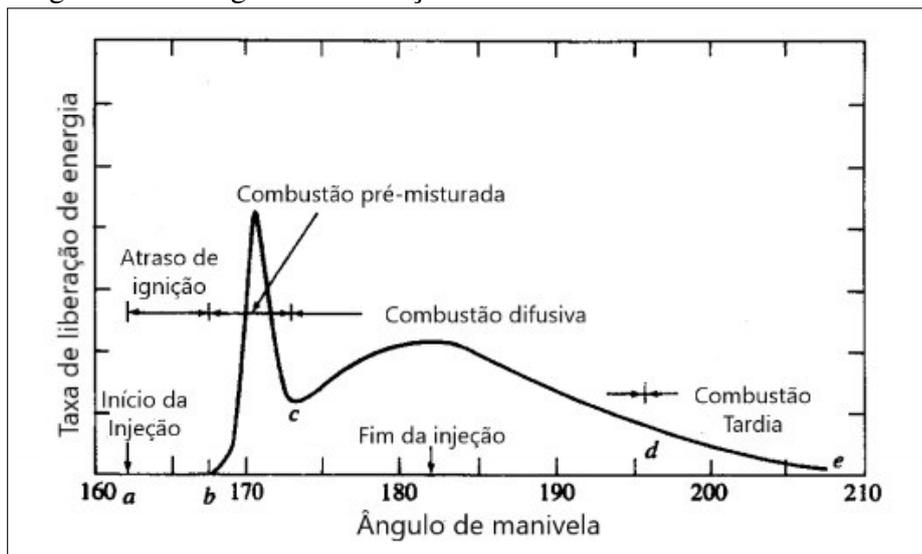
moléculas estáveis. Radicais livres são moléculas que possuem elétrons não pareados. Ao atingir determinada concentração de radicais, as reações são continuadas (BAUMGARTEN, 2006). Segundo Heywood (1988), o atraso de ignição é relacionado a diversos parâmetros como temperatura, pressão, propriedades do combustível e características da mistura ar-combustível.

Devido a complexidade do processo de ignição, alguns modelos foram desenvolvidos para representar tal processo em simulações numéricas. O modelo mais aplicado é o modelo *shell*, originalmente desenvolvido por Halstead *et al.* (1977), para modelar tal processo em motores de ignição por centelha e posteriormente adaptado para motores diesel. Esse modelo busca reduzir o grande número de reações atreladas a ignição para apenas 8, as quais são compostas por 5 espécies diferentes. Entretanto, em troca de um custo computacional mais elevado, melhores representações do processo de auto-ignição podem ser obtidas sem a utilização de modelos, através da utilização de mecanismos de reações mais complexos e detalhados, como é o caso deste estudo.

3.1.1.5 Fases da combustão no ciclo diesel

Segundo Heywood (1988), após a auto-ignição do combustível, o progresso das reações de combustão pode ser dividido em três fases: combustão pré-misturada, combustão difusiva e combustão tardia. Tais são ilustradas na Figura 12.

Figura 12 – Progresso das reações de combustão em um motor diesel



Fonte: Adaptado de Heywood (1988)

A fase pré-misturada corresponde à combustão do combustível que já evaporou e se misturou ao ar durante o período do atraso de ignição. Esse processo ocorre de maneira

abrupta, isto é, as reações progridem de maneira rápida e a taxa de liberação atinge valores altos, formando um pico característico dessa fase. É importante pontuar que, muitas vezes, a combustão pré-misturada ocorre enquanto combustível ainda é injetado.

Após a queima do combustível evaporado durante o atraso de ignição, o processo de combustão passa a ser controlado pela taxa na qual a mistura ar-combustível se faz disponível, dando início a fase difusiva. Esse período é responsável pela queima da maior parcela do combustível e é caracterizado por altas temperaturas. Após o início dessa fase, a taxa de liberação de energia pode ou não atingir um segundo pico, o qual, geralmente, é menor que o pico da combustão pré-misturada. A última fase, conhecida como combustão tardia, é caracterizada pela liberação de energia de resíduos de combustível não queimado (HEYWOOD, 1988).

3.1.1.6 Cinética Química

Conforme mencionado anteriormente, o processo de combustão em motores diesel, consiste em uma sequência de reações químicas iniciadas pela interação entre as moléculas de combustível com o oxigênio presente no ar aspirado. Por muito tempo, o foco da análise da cinética das reações foi entender sob que circunstâncias os componentes presentes na câmara de combustão poderiam reagir de maneira explosiva. Entretanto, atualmente, sabe-se que a análise da cinética química é de grande importância para a compreensão dos mecanismos formadores de emissões, os quais ocorrem a partir de reações mais lentas (não explosivas). Visto que a maioria dos processos de combustão são controlados por taxas de reações químicas, a compreensão dos conceitos da cinética química é fundamental para o estudo da combustão (TURNS, 2013).

Nas reações de combustão, a análise da cinética química não se dá em um único passo. Reações químicas, muitas vezes, têm como produto radicais livres. Tais radicais são extremamente reativos, portanto, ao serem formados, tendem a rapidamente se associar a outras moléculas, dando início a novas reações. O processo no qual o produto de uma reação age como reagente de outra, e assim em diante, é chamado de reação em cadeia e a combustão se enquadra como esse tipo de processo (GLASSMAN *et al.*, 2015)).

Segundo Turns (2013), conjunto de reações que descrevem o progresso químico de um processo é conhecido como mecanismo de reação. Os mecanismos buscam representar todas as reações elementares necessárias. Desse modo, o número de reações em um mecanismo pode variar bastante de acordo com sua complexidade, chegando a atingir dezenas de milhares em alguns casos. Mecanismos complexos, ou seja, com elevado número de reações, fornecem

informações detalhadas sobre o progresso do processo, entretanto sua análise demanda um alto custo computacional. Tendo isso em vista, atualmente, diversos estudos são dedicados a selecionar o número mínimo de reações para viabilizar um processo químico, visando a reduzir carga computacional sem perder informações relevantes sobre o progresso químico, dando origem a mecanismos reduzidos.

3.1.1.7 Modelo de Arrhenius

A relação estequiométrica de uma reação global, de complexidade qualquer, pode ser representada pela Equação 3.3, na qual X_j corresponde a 1 mol da espécie j , v'_{ji} é o coeficiente estequiométrico da espécie j como reagente, v''_{ji} é o coeficiente da espécie j como produto (o qual torna-se 0 caso a espécie não apareça como produto), n é o número de espécies e L é o número de reações. A seta apontando em ambos os sentidos é um indicativo que a reação ocorre de maneira direta e inversa.

$$\sum_{n=1}^n v'_{ji} X_j \leftrightarrow \sum_{n=1}^n v''_{ji} X_j \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, L \quad (3.3)$$

A lei de ação da massa afirma que a taxa de reação (RR_j) de uma espécie é proporcional ao produto das concentrações das espécies reagentes (c_j), conforme ilustrado na Equação 3.4. Cada concentração deve ser elevada a potência de seu coeficiente estequiométrico v'_{ji} . O termo k é um coeficiente de proporcionalidade conhecido como constante de velocidade de reação.

$$RR_i = k \prod_{j=1}^n c_j^{v'_{ji}} \quad (3.4)$$

A taxa de variação de concentração de uma espécie j ($\dot{\omega}_j$) corresponde à taxa de geração da espécie j menos sua taxa de destruição ao longo de L reações, conforme mostra a Equação 3.5.

$$\dot{\omega}_j = \sum_{i=1}^L (g_{er} - d_{es}) \quad (3.5)$$

Segundo Turns (2013), $\dot{\omega}_j$, para um mecanismo de varias reações também pode ser expressado conforme as equações 3.6, 3.7 e 3.8. Os termos k_{fi} e k_{ri} representam, respectivamente, as constantes de velocidade no sentido direto e inverso da reação i .

$$\dot{\omega}_j = \sum_{i=1}^L v_{ji} \cdot q_i \quad \text{para } j = 1, 2, \dots, n \quad (3.6)$$

$$v_{ji} = (v''_{ji} - v'_{ji}) \quad (3.7)$$

$$q_i = k_{fi} \prod_{j=1}^n c_j^{v'_{ji}} - k_{ri} \prod_{j=1}^n c_j^{v''_{ji}} \quad (3.8)$$

Os coeficientes de proporcionalidade, k_{fi} e k_{ri} , são fortemente dependentes da temperatura e são relacionados entre si por meio da Equação 3.9, na qual o termo K_c ilustra a constante de equilíbrio, definida a partir das concentrações das espécies. Visto isso, nota-se que, tendo conhecimento de K_c e de um dos coeficientes de proporcionalidade, torna-se possível determinar o valor do outro coeficiente. O valor de k_{fi} pode ser determinado a partir de uma equação do tipo Arrhenius, como mostra a Equação 3.10. Nessa equação o termo A_i é denominado de coeficiente pré exponencial da espécie, o termo B_i é o expoente da temperatura, \tilde{R} é a constante universal dos gases e o termo $E_{A,i}$ é a energia de ativação da espécie i . Os valores de A_i , B_i e $E_{A,i}$ são tabelados para diversas espécies químicas.

$$\frac{k_{f,i}}{k_{r,i}} = \frac{c_j^{v''_{ji}}}{c_j^{v'_{ji}}} = K_c \quad (3.9)$$

$$k_{f,i} = A_i \cdot T^{B_i} \cdot \exp\left(\frac{E_{A,i}}{\tilde{R} \cdot T}\right) \quad (3.10)$$

A constante de equilíbrio determinada a partir das concentrações (K_c) é diretamente relacionada a constante de equilíbrio determinada a partir das pressões parciais, (K_p). Por consequência, os coeficientes de proporcionalidade também estão relacionados com (K_p). A relação entre K_c e K_p é mostrada na Equação 3.11, na qual o termo p_i^o denota a pressão parcial da espécie i .

$$K_c = K_p \left(\frac{p_i^o}{\tilde{R} \cdot T}\right)^{\sum_{n=1}^n v'_{ji}} \quad (3.11)$$

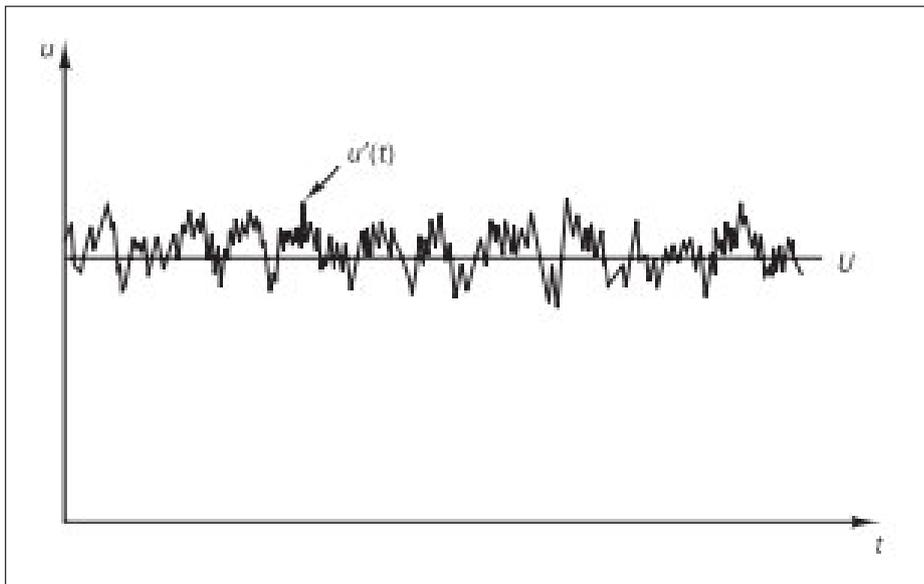
3.2 Turbulência

3.2.1 Caracterização da turbulência

No estudo da mecânica dos fluidos observa-se a existência de dois tipos principais de escoamentos: laminar e turbulento. O escoamento laminar é caracterizado pelo movimento

ordenado das partículas do fluido ao longo de trajetórias bem definidas em camadas lisas, ou lâminas. Já o escoamento turbulento é caracterizado pelo movimento desordenado das partículas, as quais se misturam enquanto se movimentam ao longo do escoamento devido as flutuações caóticas de pressão e velocidade. Uma medição da velocidade de um escoamento turbulento está ilustrada na Figura 13. Além disso, é válido ressaltar que o escoamento turbulento possui caráter transiente, ou seja, é dependente do tempo (FOX *et al.*, 2003).

Figura 13 – Exemplo de medição de velocidade em função do tempo em um escoamento turbulento



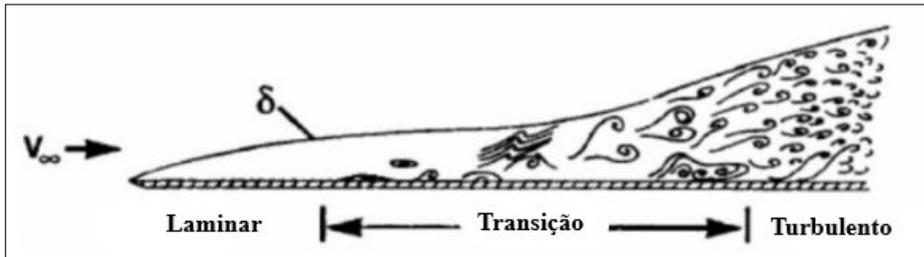
Fonte: Versteeg e Malalasekera (2007)

A caracterização do tipo de escoamento é realizada a partir do número de Reynolds (Re), um parâmetro adimensional que relaciona a intensidade das forças inerciais, oriundas do movimento da massa de fluido, e viscosas, as quais tendem a desacelerar o escoamento. Esse número pode ser calculado a partir da Equação 3.12, na qual ρ é a densidade do fluido, u é a velocidade do escoamento, L é um comprimento característico do escoamento. Caso Re tenha valores altos, considera-se que os efeitos viscosos são desprezíveis em relação aos inerciais, caso ele seja baixo, considera-se que as forças inerciais agem como um freio ao escoamento, prevenindo um aumento descontrolado da velocidade. Regimes laminares são caracterizados por baixos valores de Re , enquanto turbulentos apresentam altos valores. Define-se um escoamento como turbulento quando Re é superior a 2500 em escoamentos confinados ou superior a 500000 em escoamentos abertos. A transição de um escoamento laminar para um turbulento esta ilustrada

na Figura 14.

$$Re = \frac{\rho \cdot u \cdot L}{\mu} \quad (3.12)$$

Figura 14 – Transição de escoamento laminar para turbulento



Fonte: Schlichting *et al.* (1974)

Em aplicações de engenharia, boa parte dos escoamentos são turbulentos. O movimento caótico das partículas promove uma grande difusividade das propriedades do fluido, como temperatura e momento linear. Portanto, em diversos casos, esse tipo de regime é induzido propositalmente. Em motores diesel, por exemplo, a ausência de turbulência no escoamento dentro da câmara de combustão dificultaria a mistura de combustível injetado e ar, comprometendo, seriamente, o processo de combustão.

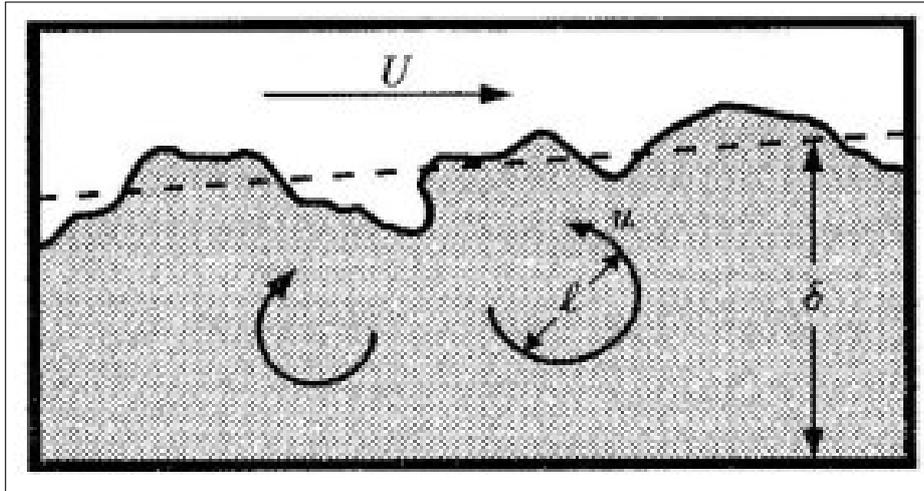
3.2.2 Cascata de energia

Conforme mencionado, a alta taxa de mistura relacionada a escoamentos turbulentos é desejada em algumas aplicações. Essa alta difusividade está relacionada a uma das principais características desse regime, a presença de vórtices. Tais vórtices carregam em si a maior parte da energia cinética do escoamento, de modo que quanto maior o vórtice, maior a quantidade de energia armazenada nele. Os vórtices possuem diversos tamanhos e podem ser definidos como movimentos turbulentos que possuem propriedades similares dentro de uma região de dimensão l . Vórtices com dimensão l possuem velocidade u e uma escala característica de tempo τ , a qual é definida pela Equação 3.13 (POPE, 2001).

$$\tau = \frac{l}{u} \quad (3.13)$$

Os maiores vórtices, também conhecidos como vórtices de grande escala, possuem dimensão comparável ao comprimento característico do escoamento, L , conforme observado na Figura 15. Devido à grande quantidade de energia armazenada em si, os vórtices de grande

Figura 15 – Representação de vórtices turbulentos de dimensão l e velocidade u , em um escoamento de velocidade U e camada limite com espessura δ .



Fonte: Wilcox (2006)

escala tornam-se instáveis e tendem a dissipar sua energia. Segundo Nieuwstadt *et al.* (2016), parte dessa energia é dissipada na forma de calor, pois, apesar dos efeitos viscosos serem ínfimos, os gradientes de velocidade em escalas microscópicas tornam-se tão grandes que a presença de atrito não pode ser negligenciada. O restante dessa energia é transferida para vórtices menores, os quais se dissipam em vórtices ainda menores, pelo mesmo procedimento, até atingirem um estado mais estável, no qual as forças viscosas se tornem relevantes. Esse estágio é alcançado quando o número de Reynolds atinge valores suficientemente baixos. Essa transmissão de energia para vórtices sucessivamente menores chama-se Cascata de Energia (POPE, 2001).

3.2.3 Hipóteses de Kolmogorov

Conforme já mencionado, as características dos vórtices de grande escala, devido a sua proporção, podem ser comparáveis às do escoamento em si. Entretanto, resta saber qual o comportamento dos vórtices menores e como seus valores de l , u e τ variam ao longo do processo da cascata de energia. A partir deste problema, Kolmogorov (1941) desenvolveu três hipóteses que visam a detalhar o comportamento dos vórtices menores. Com o intuito de facilitar a compreensão, a partir deste ponto no presente estudo será adicionado o subscrito $_0$ à simbologia referente à dimensão, à velocidade e ao tempo característicos dos grandes vórtices. Portanto, a simbologia referente a esses parâmetros será apresentada como l_0 , u_0 e τ_0 , respectivamente.

A primeira hipótese diz respeito a isotropia dos pequenos vórtices. Vórtices de grande escala são considerados anisotrópicos, isto é, suas propriedades variam com a direção. Entretanto,

essa anisotropia é perdida durante a cascata de energia, uma vez que, ao reduzir suficientemente o tamanho dos vórtices suas propriedades podem ser consideradas estatisticamente iguais, independente da direção. Portanto, segundo Pope (2001), torna-se necessária a introdução de uma escala de comprimento l_{EI} que separe vórtices isotrópicos de anisotrópicos. Esta distinção ocorre em $l_{EI} \approx \frac{l_0}{6}$, de modo que vórtices anisotrópicos possuem dimensões maiores que a estimada ($l > l_{EI}$) e vórtices isotrópicos são menores ($l < l_{EI}$).

Em sua segunda hipótese, Kolmogorov afirma que existem dois processos dominantes em vórtices de pequena escala. O primeiro é a taxa de dissipação de energia para escalas sucessivamente menores, a qual está ligada ao parâmetro ε . Tal parâmetro corresponde à taxa média de dissipação de energia cinética e será discutido, detalhadamente, mais adiante neste estudo. O segundo processo é a dissipação viscosa, a qual está relacionada a viscosidade cinemática (ν), sendo esta definida pela Equação 3.14 .

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \quad (3.14)$$

A partir dos parâmetros ε e ν , torna-se possível definir escalas únicas de dimensão, velocidade e tempo que se apliquem aos menores vórtices no domínio $l < l_{EI}$. Tais escalas são conhecidas como escalas de Kolmogorov e são definidas, respectivamente, pelas equações 3.15, 3.16 e 3.17.

$$\eta \equiv \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (3.15)$$

$$u_\eta \equiv (\nu \cdot \varepsilon)^{\frac{1}{4}} \quad (3.16)$$

$$\tau_\eta \equiv \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.17)$$

Analisando as equações acima, é possível observar que o número de Reynolds relacionado com as escalas de Kolmogorov é 1, conforme se observa na Equação 3.18. Isso condiz com a definição de cascata de energia, a energia dos grandes vórtices é transferida para vórtices menores até Re atingir valores pequenos e as forças viscosas se tornarem efetivas.

$$Re = \frac{\eta \cdot u_\eta}{\nu} = 1 \quad (3.18)$$

De acordo com Pope (2001), as relações entre as escalas dos grandes vórtices e as escalas de Kolmogorov podem ser resumidas pelas equações 3.19, 3.20 e 3.21.

$$\frac{\eta}{l_0} \sim Re^{-\frac{3}{4}} \quad (3.19)$$

$$\frac{u_\eta}{u_0} \sim Re^{-\frac{1}{4}} \quad (3.20)$$

$$\frac{\tau_\eta}{\tau_0} \sim Re^{-\frac{1}{2}} \quad (3.21)$$

A última hipótese de Kolmogorov é baseada nessas relações. Observa-se que os termos a esquerda nas equações acima diminuem com o aumento de Re . Portanto, para altos valores de Re , existe um intervalo de valores de l , os quais são pequenos comparados a l_0 , mas altos ao serem comparados com η ($l \gg l_0 \gg \eta$). Visto que os vórtices nesse intervalo são maiores que os vórtices dissipativos definidos por η , seus valores de Re podem ser considerados altos e, portanto, afirma-se que as forças viscosas não exercem papel efetivo sobre eles. Introduce-se a escala dimensional l_{DI} , a qual segue a relação $l_{DI} = 60\eta$. Vórtices com $l < l_{DI}$ são considerados dissipativos.

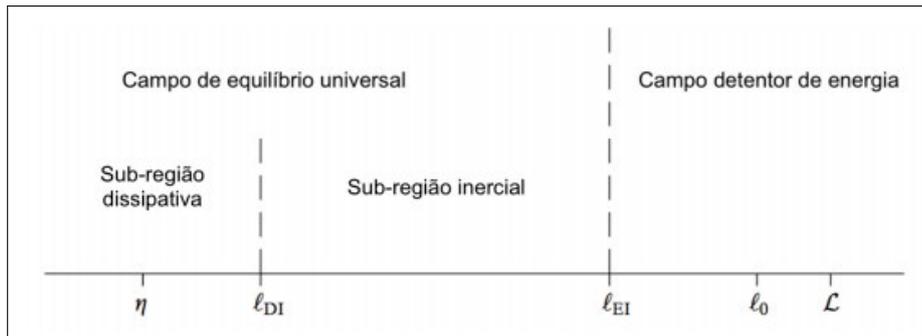
Por fim, com a introdução de l_{DI} , é possível seccionar o escoamento turbulento em 3 sub-regiões: a sub-região detentora de energia ($l_0 > l_{EI}$), na qual estão os grandes vórtices anisotrópicos; a sub-região inercial ($l_{EI} > l_{DI}$), na qual se observa apenas os efeitos das forças inerciais e a sub-região dissipativa ($l_{DI} > \eta$), onde as forças viscosas tem papel efetivo na dissipação da energia cinética turbulenta (POPE, 2001). A Figura 16 ilustra as 3 sub-regiões do escoamento turbulento com altos valores de Re . A primeira região, a direita da imagem, é a zona detentora de energia que vai desde a dimensão característica do escoamento L até o limite de isotropia l_{EI} . A segunda região, ao centro, encontra-se entre o limite de isotropia l_{EI} e o limite da zona dissipativa l_{DI} . A terceira região é a zona dissipativa, onde se encontram os menores vórtices, analisados a partir das escalas de Kolmogorov.

3.2.4 Modelagem matemática da turbulência

A turbulência é um fenômeno extremamente complexo e difícil de ser solucionado, uma vez que a grande aleatoriedade presente torna árduo o cálculo das propriedades turbulentas.

Entretanto, visto que, em grande parte das situações reais, os escoamentos são turbulentos, é de grande importância que se possa prever seu comportamento com certa precisão. Para atingir esse objetivo, foram desenvolvidas diversas abordagens para tratar, numericamente, problemas de turbulência. Tais abordagens foram divididas em três campos principais.

Figura 16 – Ilustração das 3 sub-regiões do escoamento turbulento com altos valores de Re .



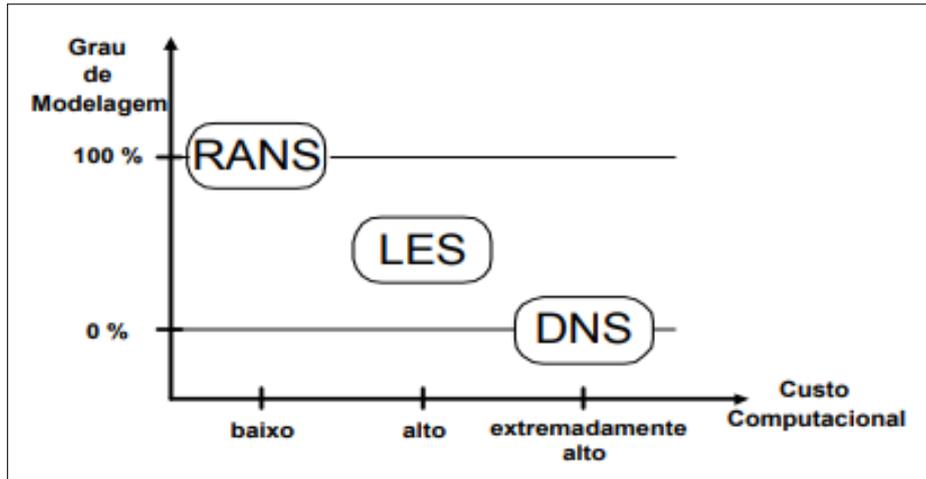
Fonte: Adaptado de Pope (2001)

O primeiro é a Simulação Numérica Direta, ou *Direct Numerical Simulation* (DNS), o qual consiste na resolução das equações tridimensionais e transientes de Navier-Stokes para cada ponto do escoamento sem a utilização de modelos. Esse método é capaz de encontrar resultados extremamente precisos. Entretanto, a malha necessária para realizar esse tipo de simulação deve ser extremamente refinada, o que aumenta exponencialmente a carga computacional exigida, inviabilizando, diversas vezes, a utilização deste método.

O segundo grupo é conhecido como Simulação dos Grandes Vórtices, ou *Large Eddy Simulation* (LES). O método consiste na simulação direta apenas dos vórtices turbulentos de grande escala e na aplicação de modelos de turbulência para analisar os vórtices menores, pois, estes têm dimensões menores que a malha. Visto que os grandes vórtices contêm a maior parte da energia, esse método fornece uma solução de alta precisão. O custo computacional atrelado a modelos LES ainda é considerado alto, apesar de menor que o custo da DNS, pois sua malha, também, deve ser bastante refinada.

O método utilizado neste estudo se enquadra no terceiro grupo, conhecido como RANS. Esse método é baseado em um conjunto de médias das equações de Navier-Stokes e de continuidade. A justificativa de sua utilização é que ele é capaz de obter soluções satisfatórias a partir de uma carga computacional relativamente baixa. Esse método será detalhado nas seções seguintes deste estudo. A Figura 17 ilustra o grau de modelagem de cada uma das abordagens numéricas comentadas em função de seu custo computacional.

Figura 17 – Grau de utilização de modelagem nos métodos de simulação de escoamento turbulento em função da carga computacional requerida pelos mesmos.



Fonte: Rezende (2009)

3.2.4.1 Equações de Conservação

O movimento das partículas de um fluido pode ser descrito a partir de equações conhecidas como equações de transporte. Estas equações são deduzidas a partir de conceitos bem estabelecidos, como o princípio de conservação da massa, a segunda lei de Newton e o princípio de conservação de energia. Essas equações podem ser resolvidas a partir de métodos discretizantes. O método dos volumes finitos considera cada unidade de espaço dividido como um volume de controle, no qual as equações de transporte podem ser integradas para a obtenção de expressões algébricas que caracterizem o escoamento real. Já o método das diferenças finitas busca resolver as equações diferenciais de transporte utilizando séries de Taylor truncadas.

A equação de conservação da massa é ilustrada na Equação 3.22. Nessa equação, ρ representa a densidade do fluido, u representa a velocidade de fluido e t denota um intervalo de tempo. O subscrito i indica o somatório do termo nas três direções espaciais.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.22)$$

A equação de conservação de momento linear está ilustrada na Equação 3.23. Assim como na Equação 3.22, termo u indica a velocidade do fluido, porém, o subscrito j representa apenas uma direção espacial. A pressão é caracterizada pelo termo p e o termo f_j identifica a aceleração de campo na direção j . O segundo termo do lado direito da igualdade (τ_{ij}) é parte do tensor de tensões viscosas T_τ . Tal tensor, ilustrado na Equação 3.24, busca definir a transferência

de momento por meio do atrito. Para fluidos newtonianos, isto é, fluidos cuja viscosidade não é função da tensão de cisalhamento aplicada, a relação linear entre tensão de cisalhamento e gradiente de velocidade do fluido é expressa conforme a Equação 3.25, nessa equação o termo δ_{ij} é chamado de delta de Kronecker ($\delta_{ij} = 1$ se $i = j$ e $\delta_{ij} = 0$ se $i \neq j$) (BAUMGARTEN, 2006).

$$\rho \cdot \frac{Du_j}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho \cdot f_j \quad (3.23)$$

$$T_\tau = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

$$\tau_{ij} = \mu \cdot \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \delta_{ij} \cdot \frac{2}{3} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (3.25)$$

As equações de Navier-Stokes são obtidas a partir da substituição da Equação 3.25 na Equação 3.23. A forma completa da equação de Navier-Stokes para uma das direções está ilustrada na Equação 3.26.

$$\begin{aligned} \rho \cdot \frac{Du_x}{Dt} = & \rho \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \cdot \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \cdot \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) = \\ & -\frac{\partial p}{\partial x} \left(\mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right) \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \left(\frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) \right) + f_x \quad (3.26) \end{aligned}$$

Por fim, a equação de conservação de energia está ilustrada na Equação 3.27. Nessa equação o termo e representa a energia interna do fluido, o termo λ corresponde a condutibilidade térmica e o termo \dot{Q}_f indica a geração de calor por unidade de volume (BAUMGARTEN, 2006).

$$\rho \cdot \frac{De}{Dt} = \frac{\partial (\lambda \cdot \nabla T)}{\partial x_i} - p \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \dot{Q}_f \quad (3.27)$$

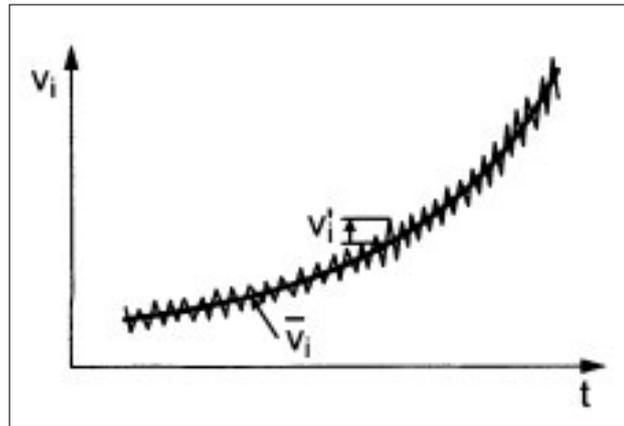
3.2.4.2 Abordagem RANS

Apesar da aleatoriedade dos valores das propriedades do escoamento ser uma das características marcantes da turbulência, esses valores tendem a variar ao redor de uma média.

Desse modo, as propriedades do escoamento podem ser divididas em dois componentes; um médio e um flutuante. Esse procedimento é chamado decomposição de Reynolds e está ilustrado pela Equação 3.28, na qual o termo a esquerda da igualdade representa o valor instantâneo da propriedade, o termo com barra denota o componente médio e o termo com apóstrofo denota o componente flutuante (STIESCH, 2003). Uma ilustração de tal procedimento de decomposição é ilustrada na Figura 18.

$$u_i(\vec{x}, t) = \bar{u}_i(\vec{x}, t) + u_i'(\vec{x}, t) \quad (3.28)$$

Figura 18 – Exemplo de decomposição de Reynolds de uma propriedade V_i de um escoamento turbulento.



Fonte: Stiesch (2003)

O componente médio é obtido através de uma média temporal, conforme ilustrado na Equação 3.29 para uma propriedade aleatória ϕ . É importante ressaltar que o intervalo de tempo (Δt) deve ser curto o suficiente para identificar as variações de um regime transiente.

$$\bar{\phi}_i = \frac{1}{\Delta t} \cdot \int_t^{t+\Delta t} \phi_i \cdot dt \quad (3.29)$$

Para escoamentos compressíveis com mistura de gases, como é o caso em motores de combustão interna, é interessante a utilização da média de Favre, a qual pondera os valores a partir de sua massa e esta ilustrada pelas equações 3.30 e 3.31. Apenas as propriedades térmicas e as velocidades são ponderadas pela massa; propriedades do fluido, como densidade e pressão, se mantêm tratadas apenas pela decomposição de Reynolds (ANDERSON *et al.*, 2016).

$$\phi_i = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (3.30)$$

$$\tilde{\phi}_i = \frac{\bar{\rho}\phi}{\bar{\rho}} \quad (3.31)$$

Ao aplicar esta decomposição ponderada, seguida pela média temporal, nas equações de conservação de massa e momento linear, obtém-se as equações 3.32 e 3.33. Pode-se observar o aparecimento de um termo extra ($\rho u_i'' u_j''$) na equação de conservação de momento linear. O novo termo é chamado de tensão de Reynolds ($\tau_{ij t}$) e pode ser representado por uma matriz 3x3 simétrica, possuindo seis componentes independentes entre si, conforme representado na Equação 3.34. Apesar do nome, a tensão de Reynolds não é uma tensão, mas um efeito inercial causado pela variação de momento linear oriunda da turbulência (BAUMGARTEN, 2006).

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.32)$$

$$\bar{\rho} \frac{D \tilde{u}_j}{Dt} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{d}{dx_i} (\tau_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}) \quad (3.33)$$

$$\tau_{ij t} = \rho u_i'' u_j'' = \rho \cdot \begin{bmatrix} u_x'' \cdot u_x'' & u_x'' \cdot u_y'' & u_x'' \cdot u_z'' \\ u_y'' \cdot u_x'' & u_y'' \cdot u_y'' & u_y'' \cdot u_z'' \\ u_z'' \cdot u_x'' & u_z'' \cdot u_y'' & u_z'' \cdot u_z'' \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

A presença das seis incógnitas adicionadas ao sistema com as tensões de Reynolds faz o número de variáveis superar o número de equações. Este problema é conhecido como problema de fechamento da turbulência. Torna-se necessário, portanto, encontrar novas equações para igualar-se o número de incógnitas, as quais podem ser obtidas a partir de modelos de turbulência.

Segundo Versteeg e Malalasekera (2007), alguns dos modelos de turbulência mais utilizados, como é o caso do modelo $k - \varepsilon$ aplicado neste estudo, são baseados na hipótese de Boussinesq. Tal hipótese afirma que a tensão de Reynolds varia proporcionalmente à tensão do fluido, de maneira análoga às tensões viscosas. Tal proporcionalidade é obtida a partir de um parâmetro denominado viscosidade turbulenta (μ_t), expresso na Equação 3.35. Baumgarten (2006) pontua que, apesar do nome, a viscosidade turbulenta não é uma propriedade do fluido.

O termo k que surge na Equação 3.35 é chamado de energia cinética turbulenta por unidade de massa. Este parâmetro representa a quantidade de energia cinética oriunda das

flutuações de velocidade e pode ser obtido a partir da soma dos termos da diagonal principal da matriz apresentada na Equação 3.34 (BAUMGARTEN, 2006). A energia cinética turbulenta é um ponto chave para o modelo de turbulência adotado neste estudo.

$$\tau_{ij} = \rho u_i'' u_j'' = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho \delta_{ij} k \quad (3.35)$$

$$k = \frac{1}{2} \overline{u_i'' u_i''} = \frac{1}{2} (\overline{u_x'' u_x''} + \overline{u_y'' u_y''} + \overline{u_z'' u_z''}) \quad (3.36)$$

3.2.4.3 Modelo $k - \varepsilon$

Conforme mencionado na subseção anterior, a modelagem da turbulência é necessária para resolver o problema do fechamento matemático deste fenômeno. Devido a alta complexidade inerente a escoamentos turbulentos, um único modelo capaz de resolver qualquer situação ainda não foi desenvolvido. Entre os diversos modelos existentes, deve-se escolher o que melhor se aplica ao tipo de escoamento analisado, visando sempre a obtenção dos melhores resultados a partir do menor custo computacional. Os modelos podem ser classificados a partir do número de equações diferenciais parciais necessárias para descrevê-los (BAUMGARTEN, 2006).

Dentre os diversos modelos, destaca-se o $k - \varepsilon$. Segundo Pope (2001), esse modelo é o mais utilizado em aplicações práticas devido a sua robustez e facilidade de aplicação. O modelo $k - \varepsilon$, desenvolvido por Launder e Spalding (1974), pertence ao grupo de duas equações, uma para k e outra para ε . Neste modelo, a velocidade e a dimensão características da turbulência podem ser representadas a partir de da energia cinética turbulenta (k) e da taxa de dissipação desta energia (ε) conforme as equações 3.37 e 3.38.

$$u_t = k^{\frac{1}{2}} \quad (3.37)$$

$$l_t = \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon} \quad (3.38)$$

Segundo Versteeg e Malalasekera (2007), a utilização deste modelo só se torna possível pois a quantidade de energia extraída do escoamento pela turbulência é equivalente a quantidade de energia dissipada pelos pequenos vórtices. Tais autores ainda afirmam que, a

partir de uma análise dimensional, é possível especificar a viscosidade turbulenta conforme a Equação 3.39, na qual C_μ é uma constante do modelo. Além disso, a taxa de dissipação de energia ε pode ser analisada a partir da Equação 3.38. A partir da substituição das equações 3.37 e 3.38, na Equação 3.39, é possível a obtenção da viscosidade turbulenta em função de k e ε , como mostra a Equação 3.40.

$$\mu_t = C_\mu \cdot \rho \cdot l \cdot u_t \quad (3.39)$$

$$\mu_t = C_\mu \cdot \rho \cdot \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.40)$$

As equações de transporte para k e ε , segundo Launder e Spalding (1974), são mostradas nas equações 3.42 e 3.43. Ao determinar cada equação nas três direções espaciais, o fechamento matemático da turbulência torna-se possível, pois o número de equações se iguala ao número de incógnitas. Os termos C_μ , C_1 , C_2 , C_ε e C_k não são universais e precisam ser ajustados de acordo com o problema. Entretanto, após extensivos estudos com escoamentos turbulentos, é recomendado, a partir do trabalho de Jones e Launder (1972), a utilização dos seguintes valores:

$$C_\mu = 0.09, C_1 = 1.44, C_2 = 1.92, C_\varepsilon = 1.3, C_k = 1 \quad (3.41)$$

$$\frac{D\varepsilon}{Dt} = \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{C_\varepsilon} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + \frac{C_1 \mu_t \varepsilon}{\bar{\rho} k} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - C_2 \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.42)$$

$$\frac{Dk}{Dt} = \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{C_k} \cdot \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + \frac{\mu_t}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \varepsilon \quad (3.43)$$

3.3 Combustão turbulenta

A turbulência, por si só, é um fenômeno com alto grau de complexidade. Ao se analisar a turbulência em escoamentos reativos, como é o caso da combustão, a dificuldade do problema aumenta, pois, deve-se levar em consideração, também, a cinética química atuante no processo. Entretanto, em diversas aplicações de engenharia, este é o regime de escoamento em questão. Em motores de combustão interna, por exemplo, as altas taxas de mistura proporcionadas pela turbulência possibilitam seus sistemas de combustão se tornarem cada vez menores (WARNATZ *et al.*, 1996).

3.3.1 Equação de conservação da massa para uma espécie A

Além das equações de conservação já introduzidas neste texto, para o estudo de escoamentos reativos, é necessária a introdução da equação de conservação de massa para as espécies presentes. Isto é necessário pois, para realizar a devida análise da cinética química do processo, cada espécie deve ser levada em conta individualmente, visto que as taxas de suas concentrações estão diretamente relacionadas com o progresso das reações (GLASSMAN *et al.*, 2015). Segundo Kuo e Acharya (2012), a equação de conservação de massa para uma espécie química A pode ser ilustrada pela Equação 3.44, na qual, ρ_A é a densidade da espécie A, \dot{m}_{Ai} representa o fluxo de massa da espécie A para o interior do volume de controle e $\dot{\omega}_A$ representa a taxa de produção da espécie A, conforme introduzido anteriormente neste estudo.

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \frac{\partial \dot{m}_{Ai}}{\partial x_i} = \dot{\omega}_A \quad (3.44)$$

O fluxo de massa \dot{m}_{Ai} pode ser reescrito segundo a lei de Fick e a densidade da espécie A pode ser determinada pela relação $\rho_A = \rho \cdot Y_A$, sendo Y_A a fração mássica de A. Desse modo, a Equação 3.44 passa a ser representada conforme a Equação 3.45, na qual D_A é o coeficiente de difusividade de A (KUO; ACHARYA, 2012).

$$\frac{\partial \rho Y_A}{\partial t} + \frac{\partial \rho_A u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \cdot D_A \cdot \frac{\partial Y_A}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_A \quad (3.45)$$

3.3.2 Abordagem RANS em escoamentos reativos

Para escoamentos reativos, aplica-se a mesma metodologia utilizada para escoamentos não-reativos. Ao aplicar a média de Favre sobre a Equação 3.45, obtém-se a Equação 3.46. O termo Γ é especificado pela Equação 3.47 (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_A}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_A}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_A \frac{\partial \tilde{Y}_A}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \cdot D_A \cdot \frac{\partial \tilde{Y}_A''}{\partial x_i} \right) + \tilde{\omega}_A \quad (3.46)$$

$$\Gamma_A = \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_t}{\sigma_A} \quad (3.47)$$

Segundo Libby e Williams (1980), o termo de médio de produção da espécie ω_a deve receber atenção especial, pois trata-se de um termo altamente não linear. Os autores

demonstram a dificuldade matemática de sua obtenção a partir de médias das concentrações. A falta da determinação deste termo impossibilita o fechamento matemático das equações, gerando o problema da combustão em ambientes turbulentos.

3.3.3 Modelagem da combustão turbulenta

O grande sucesso obtido na utilização de modelos de turbulência para realização do fechamento matemático em escoamentos não reativos levou a uma abordagem semelhante para solucionar o problema da combustão em ambientes turbulentos, dando origem aos modelos de combustão (PETERS, 2000).

De acordo com Kuo e Acharya (2012), um modelagem efetiva da combustão turbulenta deve ser composta por 4 componentes: um modelo para a cinética química, um modelo para o escoamento turbulento, um modelo capaz de associar os efeitos das flutuações turbulentas sobre o processo de combustão e um modelo que descreva os efeitos da combustão sobre o escoamento. Diversos modelos, em diferentes graus de complexidade, foram desenvolvidos ao longo dos anos. Segundo Poinso e Veynante (2005), as condições caóticas do regime turbulento afetam diretamente o processo de combustão, de modo que, em alguns casos, um modelo desenvolvido pode ser aplicável apenas em uma situação específica. Tendo isso em vista, é necessário que qualquer modelo seja validado por dados experimentais previamente à sua aplicação.

A interação entre os efeitos de turbulência e químicos pode ser descrita a partir do número de Damkohler (Da). Esse parâmetro adimensional relaciona uma escala de tempo característico do escoamento turbulento (τ_t) a uma escala de tempo característica dos processos químicos (τ_{ch}), conforme mostra a Equação 3.48. A escala de tempo de Kolmogorov τ_η , descrita anteriormente neste texto, pode ser utilizada como escala de tempo característica do escoamento turbulento (KUO; ACHARYA, 2012).

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_{ch}} \quad (3.48)$$

3.3.3.1 Modelo de tempos característicos

O modelo de combustão de tempos característicos, ou *Characteristic Time Combustion Model (CTCM)*, foi, originalmente, proposto por Abraham *et al.* (1985) para a modelagem da combustão turbulenta em motores de ignição por centelha. Esse modelo propõe a avaliação

da taxa de formação de um componente i ($\dot{\omega}_i$) a partir da Equação 3.49, na qual \tilde{c}_i indica a concentração média da espécie i , c_i^* representa a concentração da espécie em um equilíbrio termodinâmico local e τ_c é o tempo característico necessário para atingir esse equilíbrio; sendo esse último o termo que dá nome ao modelo.

$$\tilde{\omega}_i = -\frac{\tilde{c}_i - c_i^*}{\tau_c} \quad (3.49)$$

No estudo original, o tempo característico é definido a partir da soma do tempo de conversão laminar τ_l com o tempo de mistura turbulenta τ_t multiplicado por um fator de atraso f , como mostra a Equação 3.50. Segundo Stiesch (2003), o *CTCM* contorna uma deficiência presente em modelos anteriores, como o proposto por Magnussen e Hjertager (1977), nos quais o tempo característico da turbulência (τ_t) era reduzido a 0 em zonas próximas a paredes, levando a previsões não condizentes com a realidade. No modelo proposto por Abraham *et al.* (1985), caso o tempo característico se aproxime de 0, apenas o tempo de conversão laminar é levado em consideração, evitando que a taxa de produção da espécie atinja valores muito altos. O fator de atraso busca quantificar o aumento gradativo dos efeitos de turbulência sobre a combustão a medida que a queima se propaga, seu valor inicial é 0 e aumenta até atingir a unidade após certo tempo.

$$\tau_c = \tau_l + \tau_t \cdot f \quad (3.50)$$

A adaptação do modelo de tempos característicos para motores de ignição por compressão foi realizada por Patterson *et al.* (1994). Nesse estudo foi introduzida uma formulação nova para o fator de atraso, passando este a ser função da composição local. Tal formulação está ilustrada na Equação 3.51, na qual r relaciona as frações mássicas (Y_i) dos produtos da combustão com as do total de espécies reativas, representando, desta maneira, a completude da combustão.

$$f = \frac{1 - e^{-r}}{0.632} \quad (3.51)$$

$$r = \frac{\tilde{Y}_{CO_2} + \tilde{Y}_{CO} + \tilde{Y}_{H_2} + \tilde{Y}_{H_2O}}{1 - \tilde{Y}_{N_2}} \quad (3.52)$$

Um nova formulação para a obtenção do tempo característico laminar (τ_l) também é proposta por Patterson *et al.* (1994). Essa nova abordagem propõe que o termo laminar seja obtido a partir de uma equação de Arrhenius para o consumo de combustível, considerando que a concentração de combustível no equilíbrio é zero. Esta formulação é mostrada na Equação 3.53 na qual $\tilde{\rho}_F$ denota a densidade média do combustível e $\tilde{\omega}_F$ representa a taxa de consumo do combustível, sendo esta função do número de espécies e da temperatura.

$$\tau_l = - \frac{\tilde{\rho}_F}{\tilde{\omega}_F(\tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \dots, \tilde{\rho}_n, \tilde{T})} \quad (3.53)$$

Nos estudos citados, uma única escala de tempo característico foi utilizada para todas as espécies. Entretanto, segundo Xin *et al.* (1997), as espécies CO e H entram em equilíbrio antes das demais. Tendo isso em vista suas escalas de tempo devem ser apenas uma fração da escala dos outros elementos, conforme mostra a Equação 3.54. Os autores também observaram que, quando se utiliza Recirculação dos Gases de Exaustão (EGR), é comum a presença de resíduos de um ciclo anterior antes do início da combustão. Este efeito pode ocasionar erros no cálculo da completude da combustão, conforme a Equação 3.53. Desse modo, visando a contornar este problema a Equação 3.53 deve ser reescrita conforme a Equação 3.55 (XIN *et al.*, 1997).

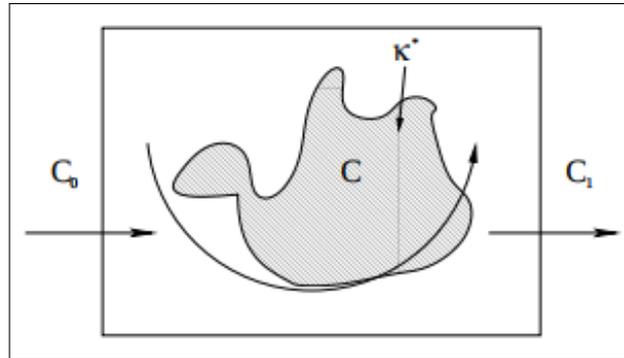
$$\tau_{CO} = \tau_H = 0.2 \cdot \tau_c \quad (3.54)$$

$$r = \frac{\tilde{Y}_{CO_2} + \tilde{Y}_{CO} + \tilde{Y}_{H_2} + \tilde{Y}_{H_2O}}{1 - \tilde{Y}_{N_2} - \tilde{Y}_{CO_2,r} - \tilde{Y}_{H_2O,r}} \quad (3.55)$$

3.3.3.2 Modelo do Reator Parcialmente Agitado - PaSR

De acordo com Golovitchev *et al.* (2000), o modelo de combustão do reator parcialmente agitado, ou *PaSR*, parte do pressuposto que, durante a simulação de um escoamento reativo, uma célula computacional deve ser dividida em duas zonas: uma em que ocorrem todas as reações, enquanto na outra nenhuma reação ocorre. Segundo Nordin (2001), o modelo *PaSR* visa a detalhar a relação entre as duas zonas, conectando fenômenos que ocorrem em escalas de dimensão inferior ao refino da malha e fenômenos que podem ser descritos pela malha utilizada.

Figura 19 – Exemplo de célula computacional segundo o modelo PaSR



Fonte: Nordin, 2001

A Figura 19 ilustra uma célula computacional segundo o modelo. O termo c_0 corresponde a concentração inicial de uma espécie química na entrada do reator. O termo c se refere a concentração da espécie na zona reativa, ilustrada como a área sombreada. O termo C_1 corresponde a concentração da espécie na saída do reator e o termo k^* corresponde a fração mássica de mistura ar-combustível que reage. É válido ressaltar que características exatas da zona reativa, como o seu tamanho, são desconhecidas, uma vez que esta se encontra em uma dimensão inferior ao refino da malha.

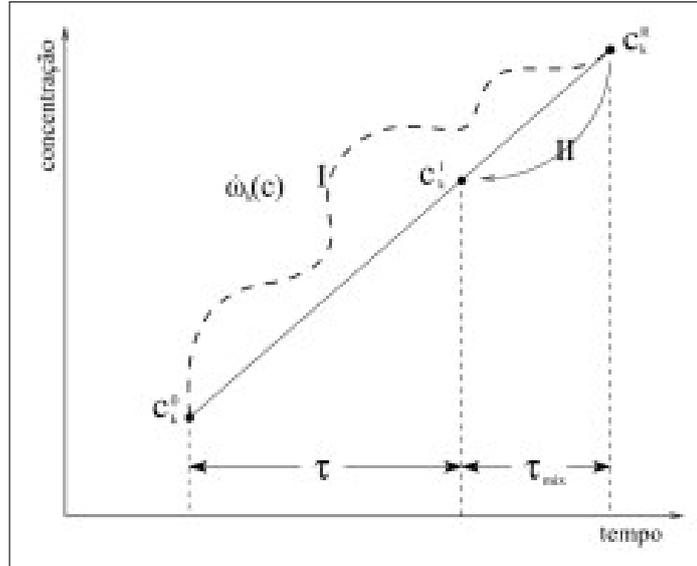
A partir de uma análise da Figura 19, tendo em vista a lei de conservação das massas, pode-se definir a concentração final (c_1) de uma espécie a partir das demais concentrações (c_0 e c) segundo a Equação 3.56. Isto é possível pois, ao fim da reação, os produtos se misturam à zona não-reativa (NORDIN, 2001).

$$c_1 = k^* \cdot c + (1 - k^*) \cdot c_0 \quad (3.56)$$

Pode-se observar que a função descrita pela Equação 3.56 é linear. O gráfico mostrado na Figura 20 ilustra o comportamento da Equação 3.56 em função do tempo. Desse modo, o processo reativo pode ser dividido em duas partes, conforme ilustrado na Figura 20. A primeira parte corresponde a mudança de concentração da espécie, de c_0 para c , na zona da reação. A segunda parte consiste no processo de mistura turbulenta dos produtos da reação com o elementos presentes na zona não reativa, de modo que a concentração varia de c para c_1 . Este processo de mistura se dá ao longo do tempo de mistura turbulenta, ilustrado por τ_{mix} . Isto posto, pode-se relacionar a variação entre a concentração inicial e final, ao passo de tempo do processo (τ). É importante ressaltar que a inclinação do gráfico é considerada igual a taxa de variação de concentração da espécie química na zona reativa, conforme mostra Equação 3.57. Ao substituir

os termos da Equação 3.57 na Equação 3.56 e rearranjando-a, obtém-se a Equação 3.58. A partir da análise das equações 3.57 e 3.58, é possível afirmar que caso o passo de tempo seja muito maior que o tempo de mistura ($\tau \gg \tau_{mix}$ e $k_* \approx 1$), a maior parte do que está na saída do reator é oriundo da zona reativa (GOLOVITCHEV *et al.*, 2000).

Figura 20 – Ilustração das concentrações ao longo da reação de acordo com o modelo PaSR



Fonte: Nordin (2001)

$$\frac{c_1 - c_0}{\tau} = \frac{c - c_1}{\tau_{mix}} = \dot{\omega}_k \quad (3.57)$$

$$k^* = \frac{\tau}{\tau + \tau_{mix}} \quad (3.58)$$

Entretanto, para se obter a concentração na saída do reator (c_1) ainda é necessário determinar a concentração na zona reativa (c). Segundo Nordin (2001), para determinar o valor de c , é necessário avaliar o termo em função de parâmetros com escala comparável ao refino da malha. Para realizar tal feito, o autor utiliza uma série de Taylor truncada na primeira derivada, como mostra a Equação 3.59. O termo $\frac{\partial \dot{\omega}_k}{\partial c}$ é considerado o inverso de um tempo químico τ_{chem} ($1/\tau_{chem} = -\frac{\partial \dot{\omega}_k}{\partial c}$) e, a partir dessa hipótese, a Equação 3.59 é rearranjada para obter a Equação 3.60. Para a implementação deste modelo, é necessário um método para obter um valor para o termo $\frac{\partial \dot{\omega}_k}{\partial c}$ e, por consequência, para o termo τ_{chem} . Ao combinar e rearranjar as equações 3.56 e 3.60 é possível chegar as equações 3.61 e 3.62. Torna-se importante pontuar que o termo

$\dot{\omega}_k(c_1)$ deve ser tratado de maneira implícita, isto é, utilizando informações do passo de tempo seguinte ((NORDIN, 2001)). De acordo com Golovitchev *et al.* (2000), o tempo de mistura turbulenta τ_{mix} pode ser definido a partir do modelo $k - \varepsilon$, conforme a Equação 3.63. C_{mix} é uma constante cujo valor pode variar no entre 0.001 e 0.3, dependendo do tipo de escoamento.

$$\dot{\omega}(c) = \dot{\omega}(c_1) + \frac{\partial \dot{\omega}_k}{\partial c} \cdot (c - c_1) \quad (3.59)$$

$$\dot{\omega}(c) = \dot{\omega}(c_1) - \frac{(c - c_1)}{\tau_{chem}} \quad (3.60)$$

$$\dot{\omega}_k(c) = \dot{\omega}_k(c_1) \cdot k \quad (3.61)$$

$$k = \frac{\tau_{chem}}{\tau_{chem} + \tau_{mix}} \quad (3.62)$$

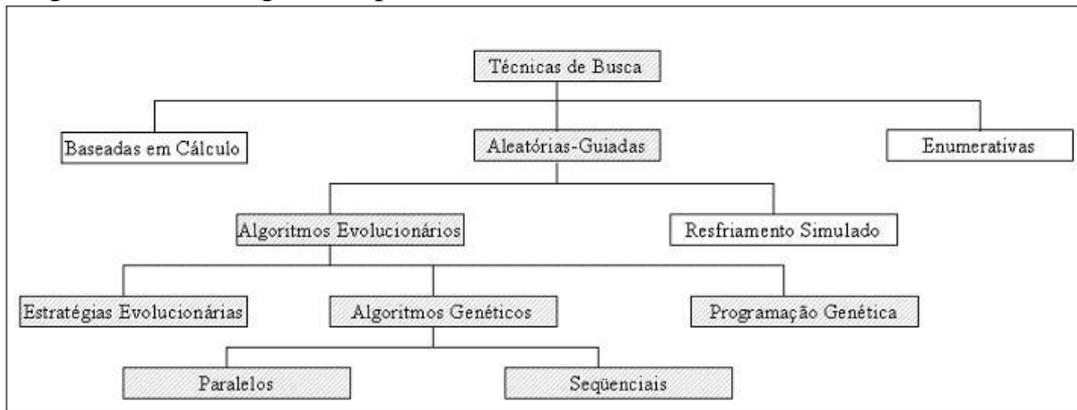
$$\tau_{mix} = C_{mix} \frac{k}{\varepsilon} \quad (3.63)$$

3.4 Algoritmos genéticos

Algoritmos genéticos (AG) são ferramentas heurísticas, isto é, que buscam solucionar problemas a partir da quantificação da proximidade da solução obtida a um objetivo pré-determinado, utilizadas para problemas de busca e de otimização. De acordo com Linden (2008) problemas de busca são o problema básico da computação, uma vez que todo problema pode ser definido como a tentativa de alcançar determinado estado, no qual uma certa condição é satisfeita. Portanto, algoritmos de busca são ferramentas que visam a resolver esse tipo de problema a partir de uma sequência de ações recomendadas que visam a atingir o objetivo pré-estabelecido (RUSSELL; NORVIG, 2016).

Conforme se observa na Figura 21, existem diversas técnicas de busca, entre elas, os algoritmos genéticos vêm recebendo um maior destaque por se tratarem de métodos robustos, relativamente simples e capazes de encontrar boas soluções. Portanto, são aplicados em diversas áreas, como na biologia, na elaboração de modelos econômicos e no aprendizado de máquinas.

Figura 21 – Fluxograma especificando diversas técnicas de busca.



Fonte: Linden (2008)

Algoritmos genéticos são parte de um ramo das ciências da computação conhecido como Computação Evolucionária (CE). Como o nome sugere, esse ramo é baseado na teoria evolucionista de Charles Darwin, a qual propõe que os indivíduos que possuem características mais adaptativas para passar pelo processo de seleção natural obtêm vantagem reprodutiva sobre os demais, facilitando, deste modo, a transmissão de suas características para indivíduos de gerações futuras, enquanto o resto da população, não tão bem adaptada, encontrará maiores dificuldades para reproduzir. Dessa maneira, as características das gerações futuras tenderão a convergir para aquelas dos indivíduos mais aptos, enquanto os traços dos menos aptos tendem a desaparecer da população. É válido ressaltar que um ponto importante do processo de seleção é a presença de mutações, a qual aumenta a variabilidade genética, ou seja, a aleatoriedade do processo. Tais mutações podem ser favoráveis, de modo a melhorar a adaptabilidade do indivíduo, ou desfavoráveis, podendo levar determinadas espécies a extinção. Segundo Linden (2008) a definição de algoritmos genéticos é:

"São algoritmos de busca baseados nos mecanismos de seleção natural e genética. Eles combinam a sobrevivência entre os melhores com uma forma estruturada de troca de informação genética entre dois indivíduos para formar uma estrutura heurística de busca."

Segundo Iyoda (2000), para a tornar a utilização de AG's viável, é necessário que o problema obedeça alguns pré-requisitos, sendo estes :

- A possibilidade de representar as soluções candidatas no formato de código genético (codificação).
- Uma população inicial suficientemente variada, de modo a permitir combinações entre características e criações de novas soluções.

- A existência de um método avaliativo que permita verificar a qualidade das soluções, definindo quais indivíduos podem transmitir características para a geração seguinte, agindo como a "pressão ambiental".
- Um método que permita a combinação de soluções, dando origem a novas.
- A presença de operadores genéticos, como *crossover* ou mutação.

3.4.1 *Micro-Algoritmo Genético*

A carga computacional atrelada a simulações multidimensionais de escoamentos é, muitas vezes, demasiadamente alta. Desse modo, a utilização de algoritmos genéticos comuns como ferramenta de otimização pode se tornar pouco factível para esses casos. Segundo Senecal (2000), para ter bom funcionamento, muitos AG's, necessitam de um grande número de indivíduos compondo a população de cada geração, geralmente tal quantidade se encontra no intervalo entre 30 e 200. Assim sendo, a realização de um processo de otimização que necessite realizar pelo menos 30 simulações a cada *loop* populacional demandaria um tempo extremamente longo para ser concluído. Visando a contornar este problema, Krishnakumar (1990) adaptou o conceito original dos algoritmos genéticos, buscando torná-los funcionais mesmo em populações com o número de indivíduos reduzido. Deu-se origem, então, aos μ - AG, os quais demonstraram combinar agilidade e robustez nos resultados.

Os μ - AG são capazes de obter bons resultados utilizando populações de apenas 5 indivíduos. Tal fato permite uma grande redução no tempo necessário para concluir o processo de otimização e diminui, também, a demanda computacional necessária. Além disso, torna-se possível a realização do processo em modo paralelo, utilizando múltiplas CPU's para gerar resultados simultaneamente, de modo a acelerar o progresso do algoritmo. Além disso, Krishnakumar (1990) afirma também que os micro-algoritmos apresentam uma convergência mais rápida que os AG's comuns em regiões próximas à solução ótima.

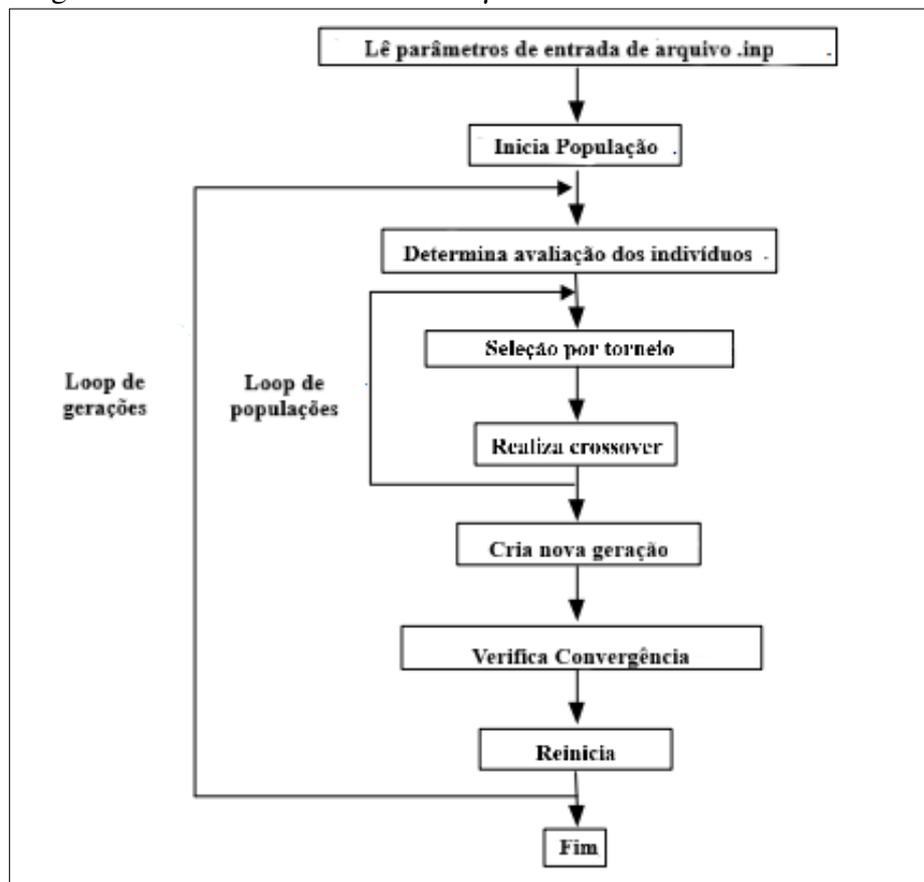
De acordo com Senecal (2000) o funcionamento de um μ -AG pode ser sintetizado pela seguinte sequência de passos, também ilustrados na Figura 22:

- **GERAÇÃO E CODIFICAÇÃO:** Um população de cinco indivíduos, codificados de acordo com o método selecionado, é gerada aleatoriamente .
- **AVALIAÇÃO:** Os indivíduos são analisados a partir de um método avaliativo definido previamente.
- **REPRODUÇÃO:** Adota-se uma estratégia elitista, ou seja, o indivíduo com a melhor clas-

sificação é, exclusivamente, replicado na geração seguinte. Os demais indivíduos são submetidos a um processo de seleção a partir do método de Torneio, com o intuito de selecionar quais originarão os demais indivíduos da geração seguinte.

- **CONVERGÊNCIA:** Verifica-se a convergência da nova população. Caso ocorra convergência, deve-se gerar uma nova população aleatoriamente, caso contrário, os indivíduos são novamente submetidos ao método avaliativo mencionado no segundo passo.
- **ENCERRAMENTO:** O algoritmo se encerra ao alcançar um critério de parada selecionado, como atingir um respectivo número de gerações ou uma avaliação, pré-determinada, que seja satisfatória.

Figura 22 – Funcionamento de um μ -AG.



Fonte: Adaptado de Senecal, 2000

3.4.1.1 Codificação

A etapa da codificação, também denominada de representação cromossômica, é o primeiro passo da aplicação de AG's e exerce um papel fundamental no seu bom desempenho, uma vez que nesta etapa as informações do problema são traduzidas de uma maneira viável a

ser tratada pelo computador. Esta consiste em definir um conjunto de símbolos para representar cada indivíduo, possibilitando, assim, as atividades dos operadores de avaliação, recombinação e mutação sobre este indivíduo. Tal representação é conhecida como cromossomo, fazendo alusão a Biologia. É válido ressaltar que, a partir deste ponto no presente estudo, os termos cromossomo e indivíduo passarão a ser utilizados como sinônimos.

Inúmeras representações cromossômicas são possíveis. por isso, o método utilizado deve ser selecionado de acordo com o problema analisado. Linden (2008) descreve algumas regras gerais que auxiliam no processo de seleção do método a se utilizar, sendo estas: deve-se prezar pela solução mais simples capaz de resolver o problema; é preferível que soluções proibidas ao problema não possuam uma representação pelo método adotado e caso existam condições associadas ao problema inicial, estas devem estar implícitas na representação. A representação de cromossomos por meio de código binário é a mais usual, transformando os indivíduos em uma sequência de 0s e 1s. Devido a sua simplicidade e facilidade de aplicação, essa representação ainda é amplamente utilizada em estudos na área, como será o caso deste. Realizando, mais uma vez, uma analogia com a Biologia, cada elemento que compõe um cromossomo é denominado de gene. Um exemplo de representação binária é ilustrado na Figura 23, na qual a coluna da esquerda mostra a representação decimal, enquanto a coluna da direita mostra os valores em binário.

Figura 23 – Exemplo de representação binária.

Número Real	Binário
0.0	0 0
1.0	0 1
2.0	1 0
3.0	1 1

Fonte: Adaptado de Senecal (2000)

Para realizar a conversão de parâmetros reais para binários, é, primeiramente, necessário ter conhecimento de dois fatores: o intervalo de operação desses parâmetros e a precisão desejada na representação binária. Tais fatores delimitam a quantidade de Homaifar *et al.* (1994), a precisão de uma variável X , em uma faixa de operação delimitada por um limite inferior X_{inf} e um superior X_{sup} , pode ser definida a partir da Equação 3.64. O termo λ é a quantidade de *bits* selecionada para representar o parâmetro. Caso a precisão desejada seja superior ao valor obtido,

deve-se aumentar o número de bits por cromossomo, ou seja, aumentar o valor de λ .

$$\pi = \frac{X_{sup} - X_{inf}}{2^\lambda - 1} \quad (3.64)$$

Além disso, é válido ressaltar que mais de uma variável pode ser representada por um único cromossomo. Para realizar isto, é necessário apenas concatenar, lado a lado, os cromossomos obtidos para cada parâmetro. Por exemplo, um cromossomo de 24 *bits* pode ser dividido em quatro sub-cromossomos, cada um com 6 *bits*; cada sub-cromossomo reduzido pode representar uma variável. É importante pontuar que os sub-cromossomos não necessitam ser do mesmo comprimento, a quantidade de *bits* deve variar de acordo com a precisão desejada. A equação Equação 3.65 ilustra um cromossomo de 8 bits dividido em dois cromossomos menores: x_1 com 2 *bits* e x_2 com 6 *bits*.

$$11110011 \rightarrow x_1 = 11 = 3, x_2 = 110011 = 51 \quad (3.65)$$

3.4.1.2 Função de avaliação

A função de avaliação, ou função de custo, é utilizada para mensurar quantitativamente a aptidão (*fitness*) de uma solução para o problema em questão. Linden (2008) afirma que a função de aptidão é análoga a uma nota dada ao indivíduo para aquele determinado caso, sendo esta nota capaz de diferir entre as soluções boas e más. A seleção da função de avaliação é específica para um problema. É possível a obtenção de diversas soluções a partir dos mesmos dados iniciais variando apenas a função de custo. Além de ser capaz de diferir soluções boas e ruins, a função deve ser também capaz de selecionar a melhor solução para o problema entre soluções sub-ótimas.

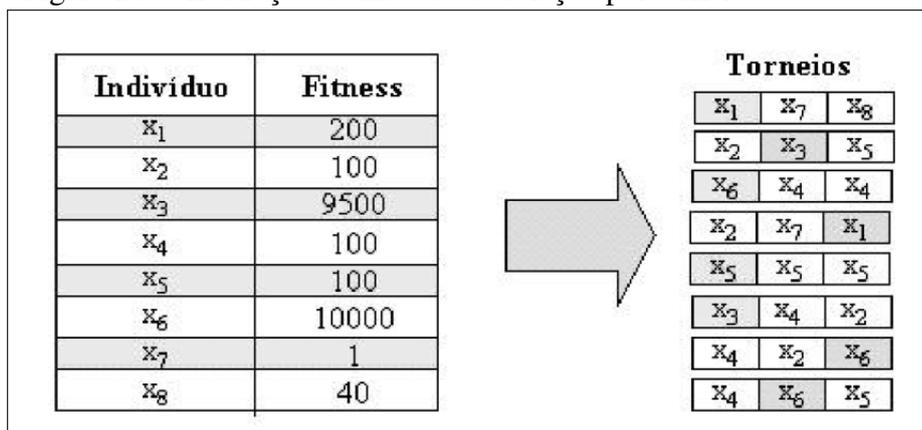
3.4.1.3 Reprodução

A função de reprodução, ou seleção de pais, em algoritmos genéticos, consiste em selecionar quais indivíduos darão origem aos membros da nova população, buscando simular o mecanismo da seleção natural, o qual já foi discutido anteriormente. Segundo Linden (2008), é fundamental privilegiar indivíduos caracterizados como aptos pela função de avaliação, favorecendo a transmissão de suas características para gerações seguintes. Entretanto, indivíduos com baixo desempenho no processo avaliativo também devem ter a chance de reproduzir, pois estes podem possuir, também, características desejáveis. Ademais, a diversidade populacional é

reduzida ao permitir apenas que os indivíduos mais aptos se reproduzam. Tal fato pode levar a uma convergência populacional precoce, prejudicando o desempenho do $\mu - AG$.

Ao longo dos anos, diversos mecanismos para reprodução foram desenvolvidos, cada um com níveis de complexidade e aplicação distintos. Neste estudo, o mecanismo escolhido foi a seleção por torneio. Segundo Goldberg e Holland (1988), este método seleciona, aleatoriamente, pares de indivíduos para competirem, de forma direta, por meio de sua avaliação. Este método, boa parte das vezes, apresenta melhores resultados que os demais métodos (GOLDBERG; DEB, 1991). A Figura 24 mostra um esquema do método do torneio. Nas colunas a esquerda, pode-se observar os oito indivíduos que compõem a população e suas respectivas avaliações. A coluna a direita mostra oito trios selecionados aleatoriamente, nos quais o elemento com maior valor de *fitness* está sombreado, sendo estes os cromossomos selecionados para reproduzir.

Figura 24 – Ilustração do método de seleção por torneio



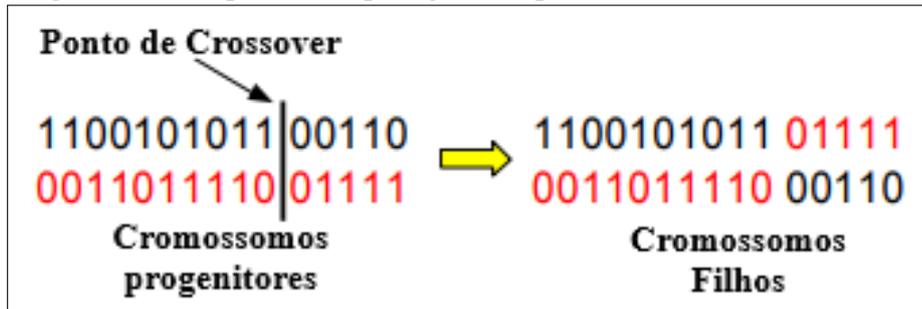
Fonte: Linden (2008)

Segundo Senecal (2000), a aplicação do método do torneio ocorre em cinco passos. No primeiro passo, o indivíduo com melhor avaliação é copiado na geração seguinte, conforme já mencionado. A etapa seguinte consiste em embaralhar os 4 indivíduos restantes para deixá-los em ordem aleatória. Em seguida compara-se a avaliação dos dois primeiros cromossomos, o melhor avaliado se torna o primeiro progenitor. O quarto passo é semelhante ao terceiro, mas, neste, a competição é realizada entre os dois indivíduos restantes, o melhor avaliado se torna o segundo progenitor. O último passo é a aplicação do operador de *crossover* sobre os dois indivíduos progenitores. Repete-se então os passos de 2 a 5, dando origem a mais dois novos indivíduos, completando, assim, uma nova população. A etapa descrita pelo primeiro passo não é obrigatória para o funcionamento do método. Entretanto, esta estratégia, conhecida como *elitista*, garante que a avaliação do melhor indivíduo da geração seguinte seja, pelo menos, igual

a da anterior.

O operador de *crossover* é uma ferramenta genética responsável por gerar novos indivíduos diferentes de seus progenitores, mas que, ainda assim, mantenham suas características. A principal ideia por trás deste operador é combinar dois indivíduos bons para gerar um novo ainda melhor. Existem diversas variações deste operador, as quais possuem complexidade variável. Neste estudo, o operador será aplicado em uma de suas formas mais simples, denominada *crossover* de múltiplos pontos. Após a seleção dos pais, selecionam-se alguns pontos de corte, definidos como uma posição entre dois *bits*, nos cromossomos progenitores. Portanto, para um cromossomo com k *bits*, existem $k - 1$ opções de ponto de corte. Após a seleção dos pontos de corte, deve-se decidir qual progenitor terá seu intervalo entre pontos de corte replicado no filho. Um cromossomo filho é gerado a partir da concatenação dos diversos pedaços dos indivíduos progenitores. O segundo filho é gerado da mesma maneira, como ilustra a Figura 25 ((LINDEN, 2008)).

Figura 25 – Esquema da aplicação do operador *crossover*.



Fonte: Adaptado de Senecal (2000)

3.4.1.4 Convergência e encerramento

Como já mencionado anteriormente, após a aplicação de um modelo de reprodução, uma nova população é gerada e, em sequência, avaliada pela função selecionada. Caso o algoritmo esteja funcionando da maneira correta, é de se esperar que o *fitness* dos indivíduos se aproxime de um determinado valor com o passar das gerações. A essa uniformidade cromossomial dá-se o nome de convergência. Segundo Senecal (2000), a convergência em $\mu - AG's$ é atingida quando 95% dos *bits* de todos os indivíduos de uma população são sequenciados de maneira idêntica. Assume-se que a população convergiu quando a condição é alcançada. Um algoritmo não é, necessariamente, encerrado quando se ocorre a convergência de uma população, uma vez que o valor de *fitness* para qual se convergiu pode não ser suficiente

para solucionar o problema. Caso o valor convergido ainda não seja suficiente, uma nova geração é aleatoriamente gerada e todo o processo descrito até este ponto se repete. Desse modo, urge que o operador adicione ao código um critério de parada. Boa parte das vezes, este critério é um determinado número de gerações. Além disso, caso seja da preferência do operador, o encerramento pode ser feito manualmente, ou seja, o operador pode interromper o código, sem prejudicar seu desempenho, no momento em que considerar o resultado apresentado satisfatório.

4 METODOLOGIA

4.1 Informações do motor estudado

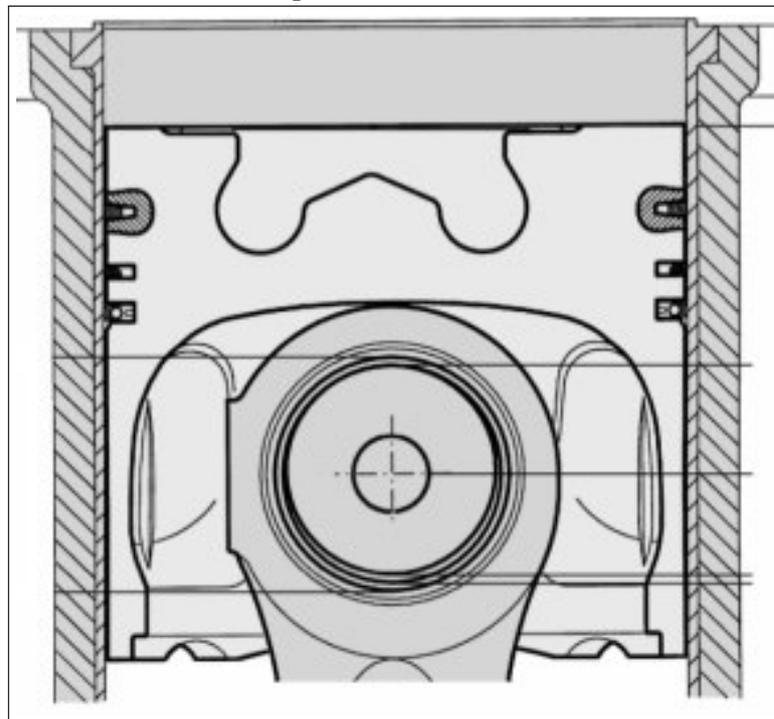
O LMCI forneceu todos os dados experimentais empregados neste estudo. Um motor diesel do modelo MWM Sprint 6.07T foi utilizado para aquisição de dados. Os dados técnicos do motor são mostrados na Tabela 1 e a geometria da câmara de combustão é ilustrada na Figura 26.

Tabela 1 – Dados técnicos do motor MWM Sprint 6.07T

Configuração	4 tempos - injeção direta
Sistema de injeção	<i>Common rail</i>
Número de orifícios injetores	5
Aspiração	Turbo aspirado
Volume deslocado	4,2 cm^3
Número de cilindros	6
Diâmetro	93 mm
Curso	103 mm
Distância entre o topo do pistão e o cabeçote	2,25 mm
Fechamento da válvula e admissão	148° antes do PMS da combustão
Abertura da válvula de escape	124,4° após o PMS da combustão

Fonte: LMCI

Figura 26 – Geometria da câmara de combustão do motor MWM Sprint 6.07T



Fonte: MWM (2001)

4.2 Simulação numérica do escoamento reativo

4.2.1 O software Kiva-3V

O LMCI forneceu a licença para utilização do *software* de simulações de escoamentos reativos Kiva-3V. Esse programa é baseado no modelo de diferenças finitas e possui código fonte acessível em linguagem FORTRAN, de modo a permitir que alterações e implementações sejam realizadas pelo operador, com o intuito de adequar e otimizar seu funcionamento, de acordo com o caso que se deseja analisar.

A versão do *software* fornecida pelo LMCI já constava com algumas modificações no código fonte. A primeira modificação foi a implementação do modelo de quebra de gotas Blob-KH-RT, com o fito de substituir o modelo Taylor Analogy Breakup (TAB), o qual é o padrão do Kiva-3V. O funcionamento do modelo Blob-KH-RT já foi explanado neste estudo e maiores informações sobre o modelo TAB podem ser obtidas no trabalho de O'Rourke e Amsden (1987).

Além da modificação no sistema de quebra de gotas, também foi implementado o modelo de cinética química complexa. Essa segunda modificação tem como finalidade permitir a utilização de mecanismos de reações de combustão mais refinados que o originalmente proposto pelo *software*, visando a uma melhor descrição de tal fenômeno. É importante pontuar que, para a implementação da cinética química complexa, foi necessária a inclusão da biblioteca de cinética química CHEMKIN-II, a qual é melhor detalhada por Kee *et al.* (1989). A implementação desta biblioteca torna-se importante uma vez que o formato lido por ela é capaz de fornecer as reações do mecanismos e as informações sobre a fase gasosa das espécies.

É necessário pontuar que, ao tratar com mecanismos de reações complexos, grandes sistemas de equações diferenciais ordinárias (EDO) surgem devido a interdependência das taxas de variação de concentração entre as espécies e a dependência dessas taxas da variação de temperatura. Estes sistemas são compostos por $n + 1$ equações, onde n é o número de espécies presente no modelo e a equação extra caracteriza a dependência da variação de temperatura. Tendo isto em vista, para solucionar tais sistemas, o pacote de integração VODE também foi integrado ao código fonte do Kiva-3V, substituindo a abordagem de integração semi-implícita, originalmente, presente no software. O pacote VODE é capaz de integrar sistemas de EDOs com elevada precisão a partir da divisão do passo de tempo do Kiva-3V em passos de tempo menores.

O trabalho de Silva (2018) detalha o procedimento de implementação da cinética

química complexa e do pacote VODE. Além disso, os processos de integração semi-implícita e pelo pacote VODE também são pormenorizados. Por fim, análises do modelo de cinética química complexa e do modelo de quebra de gotas Blob-KH-RT são realizados em tal estudo.

Além das implementações citadas, o *software* apresenta modelos para turbulência, evaporação, arrasto, choque contra a parede e formação de filmes líquidos, sendo esses dois últimos discutidos em Amsden (1997). A Tabela 2 mostra os modelos utilizados para descrever alguns dos fenômenos presentes no processo de combustão.

Tabela 2 – Modelos adotados no *software* Kiva-3V

Fenômeno	Modelo
Turbulência	$k - \epsilon$
Quebra de gotas	Blob-KH-RT
Arrasto	Arrasto de gota esférica
Evaporação	Monocomponente
Choque contra a parede	Discutido em Amsden (1997)
Formação de filmes líquidos	Discutido em Amsden (1997)
Auto-ignição	Cinética química complexa
Combustão Turbulenta	PaSR adaptado

Fonte: O autor

4.2.2 Geração e convergência de malha

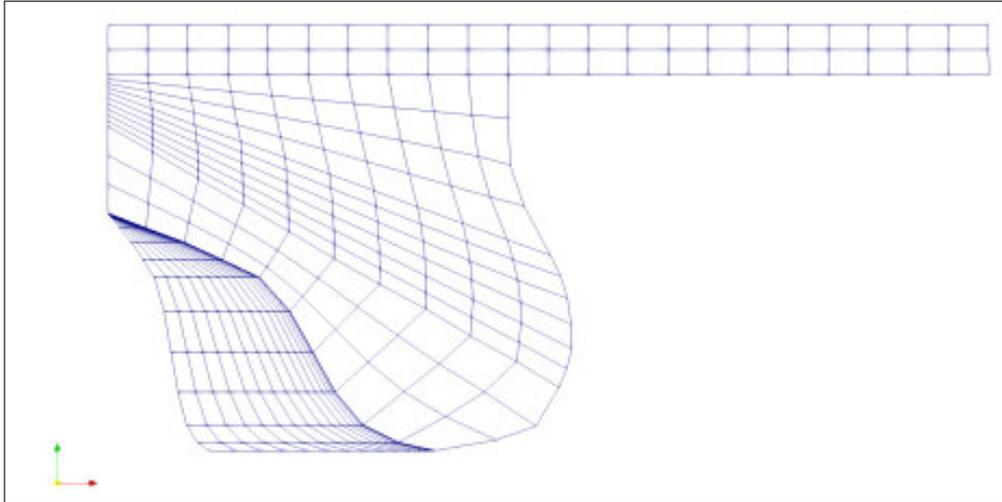
Primeiramente, é necessário pontuar que a malha utilizada neste estudo foi fornecida pelo LMCI pronta. Com efeito, a malha que representa a região do copo está ilustrada na Figura 27 e, devido ao movimento vertical do pistão, a quantidade de células computacionais entre o topo do pistão e o cabeçote variam no decorrer da simulação.

É possível observar que a malha ilustrada é dividida em 3 sub-regiões com diferentes graus de refinamento. A região superior é composta por duas camadas idênticas. A sub-região intermediária é composta por oito camadas, sendo, portanto, a mais refinada. A região inferior é composta por três camadas. É necessário ressaltar que o maior refino na região intermediária é necessário, pois, nessa área, ocorrem os processos de injeção e vaporização de combustível, além do início da combustão. Desse modo, o maior grau de refinamento permite a obtenção de mais informações sobre tais processos. Ademais, deve-se pontuar que o tamanho médio das arestas dos elementos é de $2mm$.

Tendo em vista que no motor utilizado para a obtenção dos dados experimentais deste estudo a disposição dos cinco bicos injetores se dá de maneira simétrica, no interior do cilindro, uma malha que represente apenas um quinto da câmara de combustão é suficiente para

realizar a simulação. O estudo completo da convergência da malha pode ser encontrado no trabalho de Silva (2018).

Figura 27 – Ilustração da malha utilizada.



Fonte: Silva (2018)

4.2.3 Condições iniciais e de contorno

As condições iniciais e de contorno utilizadas na simulação são baseadas nos dados experimentais fornecidos pelo LMCI e estão ilustradas na Tabela 3. É importante pontuar que o ângulo de injeção de combustível não se encontra entre tais parâmetros pois ele foi definido como uma das entradas do micro-algoritmo genético implementado, conforme será discutido a diante.

Tabela 3 – Condições de contorno das simulações.

Temperatura das paredes	598 K
Temperatura do pistão	637 K
Temperatura do cabeçote	602,2 K
Temperatura inicial do gás	404,8 K
Pressão inicial da câmara	1,381 bar
Massa de combustível injetada	33 mg
Temperatura do combustível	313,15 K

Fonte: (O autor)

4.3 Adaptações no modelo PaSR

Durante a implementação do modelo de combustão turbulenta do reator parcialmente agitado, algumas adaptações foram realizadas em relação ao modelo original descrito na Fun-

damentação Teórica deste estudo. Tendo isso em vista, o modelo final implementado possui características tanto do modelo PaSR, quanto do modelo CTCM.

Primeiramente, as equações originais do modelo PaSR, ilustradas pelas equações 3.61, 3.62 e 3.63, foram substituídas pelas relações mostradas nas equações 4.1, 4.2 e 4.3. Pode-se observar que, nas equações 4.1 e 4.3, três novos termos surgem em relação às equações originais.

$$\dot{\omega}_k(c) = \dot{\omega}_{PSR} \cdot \kappa \quad (4.1)$$

$$\kappa = \frac{\tau_{chem}}{\tau_{chem} + \tau_{mix}} \quad (4.2)$$

$$\tau_{mix} = C_{mix} \cdot f^{C_{kn}} \cdot k / \varepsilon \quad (4.3)$$

A primeira diferença que se pode observar, entre os grupos de equações, é a substituição do termo original $\dot{\omega}_{c_1}$ pelo novo termo $\dot{\omega}_{PSR}$. Conforme explicado anteriormente, a parcela $\dot{\omega}_{c_1}$ representa a taxa de variação de concentração de uma espécie na saída do reator e sua determinação é realizada de maneira implícita com informações do passo de tempo seguinte. É válido pontuar que com a implementação do pacote de integração VODE, os tamanhos dos passos de tempo utilizados podem se tornar muito pequenos, atingindo valores de até $1 \cdot 10^{-25} s$. Assim, ao se trabalhar com escalas de tempo nestas dimensões, torna-se viável assumir a hipótese de que a diferença da taxa de variação de concentração da espécie, entre um passo de tempo e o seguinte, torna-se infinitamente pequena. Com isso, é factível a determinação do termo $\dot{\omega}_{c_1}$ a partir de informações do passo de tempo atual. Para realizar tal feito, o termo $\dot{\omega}_{c_1}$ passa a ser substituído pelo termo $\dot{\omega}_{PSR}$. De acordo com Poinot e Veynante (2005), o termo $\dot{\omega}_{PSR}$ é oriundo de um modelo de combustão chamado modelo do reator perfeitamente agitado, ou *Perfectly Stirred Reactor (PSR)*, o qual assume a hipótese de que o regime turbulento não exerce influência sobre a cinética química. Entretanto, tal hipótese não é adequada para a maioria das aplicações e pode acarretar em grandes divergências entre a taxa calculada e a taxa real. Com isso, a obtenção do termo $\dot{\omega}_{PSR}$ é realizada a partir da equação de Arrhenius, como ilustra a 4.4. Portanto, torna-se necessário que, no modelo implementado, a taxa de variação de concentração do modelo *PSR* seja corrigida, com o intuito de levar em consideração os efeitos da turbulência

sobre a cinética química. Tal correção é realizada pela multiplicação de $\dot{\omega}_{PSR}$ pelo termo κ , conforme ilustrado na Equação 4.1.

$$\tilde{\omega}_{PSR}(c, T) = \dot{\omega}_{PSR}(\tilde{c}, \tilde{T}) = \sum_{i=1}^L (v''_{ji} - v'_{ji}) \cdot q_i(\tilde{c}, \tilde{T}) \quad (4.4)$$

A segunda diferença entre o modelo adaptado e o original pode ser observada na Equação 4.2, com o aparecimento de dois novos termos, f e C_{kn} . O termo f representa o fator de atraso do modelo *CTCM*. Conforme explicado anteriormente, esse fator tem a função de incrementar, de maneira gradual, o efeito da turbulência sobre a cinética química. A partir da análise das equações 4.2 e 4.1, pode-se afirmar que o aumento da escala de tempo característico da turbulência (τ_{mix}) acarreta em uma diminuição da taxa de variação de concentração da espécie ($\dot{\omega}_k(c)$). Desse modo, caso o efeito da turbulência fosse adicionado de maneira integral, desde o início do processo, o modelo implementado poderia causar uma grande diminuição nas taxas de variação de concentração, freando, por consequência, a taxa de liberação de energia da combustão além da quantidade necessária. Além disso, com o intuito de obter maior controle sobre a influência da turbulência sobre as reações químicas, foi adicionado um expoente para o fator de atraso, representado por C_{kn} , o qual deve assumir valores maiores que a unidade.

Segundo Nordin (2001), para a implementação do modelo *PaSR*, é necessário um método de determinação da escala de tempo característica das reações químicas τ_{chem} . Neste estudo, tal escala de tempo foi substituída pela escala de tempo característico proveniente do modelo *CTCM* (τ_c), ilustrada na Equação 3.49. As médias das concentrações, local e no equilíbrio termodinâmico local, podem ser obtidas com o auxílio da biblioteca CHEMKIN-II. De maneira semelhante às alterações explicadas anteriormente, a taxa média de variação de concentração da espécie é substituída pela taxa encontrada de acordo com o modelo *PSR*, portanto, a Equação 3.49 passa ser representada conforme a Equação 4.5.

$$\tau_{chem} = -\frac{\tilde{c}_i - c_i^*}{\tilde{\omega}_{PSR}} \quad (4.5)$$

4.4 Implementação do Micro-algoritmo genético

Na equação do tempo turbulento característico do modelo *PaSR* adaptado, ilustrada na Equação 4.3, os termos referentes ao multiplicador do tempo turbulento (C_{mix}) e ao expoente do fator de atraso (C_{kn}) devem ser especificados antes do início de uma simulação. Segundo

Nordin (2001), os valores de C_{mix} devem variar entre 0,001 e 0,03, de acordo com o tipo de escoamento. Entretanto, não são fornecidas maiores especificações sobre em quais situações cada valor deve ser utilizado. Já o expoente do fator de atraso (C_{kn}) é uma adaptação realizada no modelo, portanto também deve ter seu valor ajustado conforme a situação estudada. Desse modo, a partir da variação desses dois parâmetros, diversas combinações são possíveis. Portanto, com o intuito de otimizar o desempenho do modelo, um micro-algoritmo genético foi implementado, visando a facilitar o processo de busca pela melhor combinação possível.

O código do algoritmo foi desenvolvido na linguagem PYTHON e foi dividido em três arquivos: *Muga.py*, *Mugafit.py* e *Mugalib.py*. O arquivo *Muga.py* contém o código principal, os outros arquivos são chamados a partir dele. No arquivo *Mugafit.py* está codificada a função de avaliação utilizada no algoritmo. O arquivo *Muga.lib* contém todas as funções chamadas pelo código principal, com exceção da função de avaliação. Os códigos-fonte de implementação $\mu - AG$ são apresentados nos apêndices deste trabalho.

4.4.1 *Entrada dos parâmetros e Codificação*

Além do multiplicador do tempo turbulento e do expoente do fator de atraso, outros dois parâmetros foram definidos como entrada do algoritmo genético: o ângulo de injeção de combustível e o grau de *swirl* presente no cilindro. Ambos os parâmetros exercem influência direta sobre a taxa de liberação de energia do processo de combustão. No caso experimental estudado, o ângulo de injeção era de $7,5^\circ$ antes do PMS, podendo variar entre $\pm 3^\circ$. Com isso, a utilização desse parâmetro como uma das entradas do algoritmo genético visa, também, a facilitar a determinação do ponto exato de injeção. A escolha do grau de *swirl* como parâmetro de entrada se dá por motivo semelhante, uma vez que sua determinação nem sempre é uma tarefa fácil. É importante pontuar que, a partir deste momento, os termos C_{kn} , C_{mix} e ângulo de injeção serão referidos por meio das seguintes siglas: Expoente do fator de atraso (COMBKN), Multiplicador tempo turbulento (COMBKK) e ângulo de injeção de combustível (CA1INJ). Isso é feito pois, essa é sua denominação no algoritmo implementado.

Os parâmetros de entrada variam dentro de um intervalo pré-definido. Com isso, a amplitude de variação, o intervalo entre os valores e a quantidade de valores possíveis para cada variável são ilustrados na Tabela 4. Com base nessas informações, é possível determinar a quantidade de *bits* necessária para descrever cada uma das variáveis, a partir da Equação 3.64. A Tabela 5 mostra a quantidade de *bits* por variável. Após a codificação de todos os parâmetros,

um indivíduo é formado a partir da concatenação dos valores binários obtidos, compondo, então, uma *string* composta por 14 *bits*.

Tabela 4 – Parâmetros de entrada do $\mu - AG$.

Parâmetro	Amplitude	Intervalo entre os valores	N° de valores possíveis
SWIRL	0,5 ~ 2,5	0,25	8
CA1INJ	-5,85 ~ -5,5	0,05	8
COMBKK	0,005 ~ 0,02	0,001	16
COMBKN	4 ~ 11,5	0,5	16

Fonte: (O autor)

Tabela 5 – Quantidade de bits necessária para descrever os parâmetros de entrada

Parâmetro	N° de bits
SWIRL	3
CA1INJ	3
COMBKK	4
COMBKN	4

Fonte: (O autor)

4.4.2 Função de avaliação

Com o intuito avaliar a qualidade de cada uma das soluções geradas pelo algoritmo, um coeficiente de determinação R^2 foi selecionado como função de avaliação para o $\mu - AG$. Tal coeficiente, neste estudo, tem como função quantificar o ajuste da curva de taxa de liberação de energia da simulação sobre a mesma curva obtida a partir dos dados experimentais. Tendo em vista que o objetivo deste estudo é avaliar um modelo que seja capaz de se aproximar da realidade, o coeficiente R^2 se mostra como uma boa opção para discriminar os diversos resultados obtidos. O valor de R^2 pode ser obtido conforme a Equação 4.6. O termo y_i^{exp} representa o valor da taxa de liberação de energia medido experimentalmente, o termo y_i^{sim} representa o valor da taxa de liberação de energia obtida a partir da simulação e o termo \bar{y}_i^{exp} representa o valor médio das taxas de liberação de energia experimentais. O coeficiente R^2 pode variar no intervalo entre 0 e 1, sendo 1 o ajuste ideal, ou seja, quanto maior o valor do coeficiente, maior foi a capacidade da simulação de representar a situação experimental.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i^{exp} - y_i^{sim})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i^{exp} - \bar{y}_i^{exp})^2} \quad (4.6)$$

4.4.3 Reprodução

Conforme explicado anteriormente, o processo de reprodução no algoritmo é baseado em uma estratégia elitista e em uma seleção por torneio. Com isso, após a identificação do indivíduo com maior avaliação na população, 4 pares são formados, aleatoriamente, a partir dos indivíduos restantes. A partir disso, indivíduos com as melhores avaliações se tornam indivíduos progenitores e passam pelo operador de *crossover*.

Isso dito, o operador de *crossover* de múltiplos pontos implementado neste estudo deve ser discutido de maneira mais detalhada. Primeiramente, é importante pontuar que se decidiu aplicar a operação de *crossover* em todos os pontos de corte possíveis, visando a obter uma maior variabilidade nas populações. Desse modo, visto que cada indivíduo é composto por 14 *bits*, 13 pontos de corte são possíveis. A cada ponto de corte, um número aleatório é gerado pelo algoritmo para cada um dos dois indivíduos progenitores. Tais números aleatórios são, então, comparados entre si. O *bit* do indivíduo gerado, naquele ponto de corte, deve ser replicado do indivíduo progenitor que possuir o maior valor gerado aleatoriamente. Ao fim da repetição deste processo para cada um dos pontos de corte, um novo indivíduo é gerado por meio da concatenação dos *bits* selecionados. O mesmo processo é repetido para a formação do segundo indivíduo gerado a partir do mesmo par.

4.4.4 Encerramento

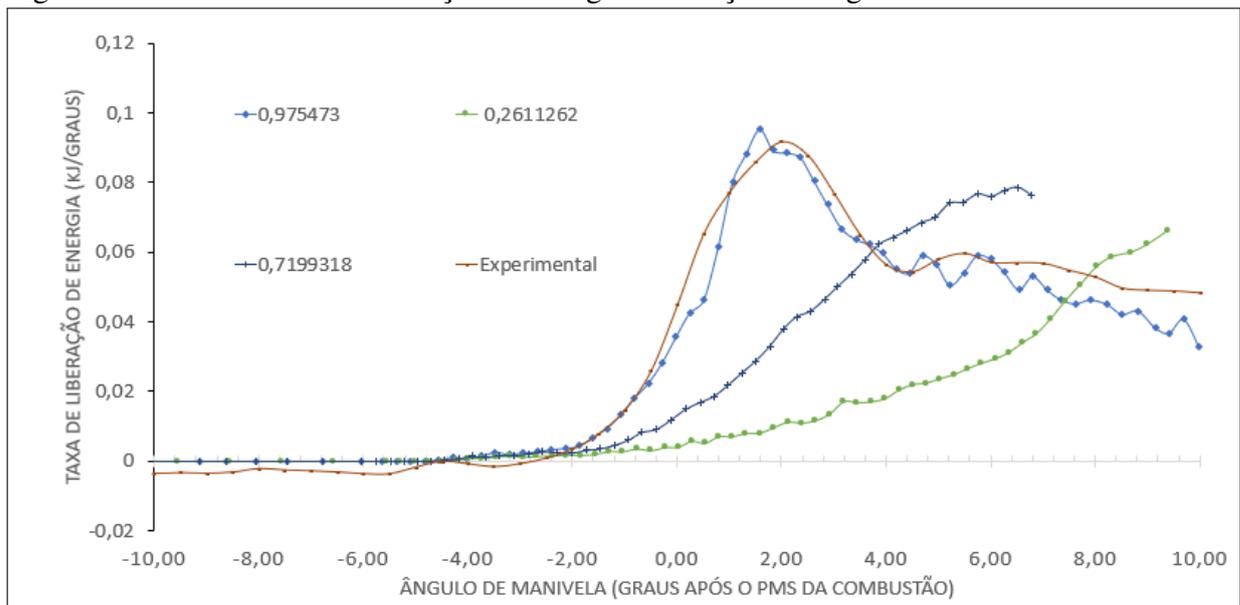
O encerramento do algoritmo acontece automaticamente, após a convergência de um número de gerações definidos pelo no arquivo *Muga.py*. Neste estudo, foi definida quantidade de 5 gerações convergidas para permitir o encerramento automático, conforme recomendado no trabalho de Senecal (2000). Além disso, o algoritmo pode ser encerrado manualmente pelo operador, a qualquer momento, sem causar nenhum prejuízo sobre os resultados obtidos até então.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Validação da Função de Avaliação Seleccionada

O bom funcionamento de qualquer algoritmo genético está diretamente relacionado ao desempenho da função de avaliação. Tendo isso em vista, antes de realizar análises mais aprofundadas sobre o desempenho do $\mu - AG$, é desejável verificar se a função seleccionada está desempenhando seu papel de maneira correta. Sabe-se que a qualidade de uma simulação pode ser mensurada pela proximidade entre os resultados obtidos e os dados experimentais. A Figura 28 mostra, para três indivíduos distintos, o gráfico da taxa de liberação de energia em função do ângulo de manivela em relação ao PMS do ciclo de combustão. A curva a partir dos dados experimentais fornecidos também é apresentada. O primeiro indivíduo obteve uma avaliação de 0,975473. O segundo indivíduo foi avaliado com um *fitness* de 0,7199318. O último indivíduo recebeu a avaliação mais baixa, 0,2611262. É possível observar que, nos casos com pior avaliação, não ocorre o rápido pico de liberação de energia relacionado com a combustão pré-misturada, diferentemente do que ocorre de forma característica na combustão a diesel. Portanto, afirma-se que a função de avaliação seleccionada foi capaz de discriminar, de maneira correta, soluções boas, intermediárias e ruins.

Figura 28 – Curvas de taxa liberação de energia em função do ângulo de manivela.



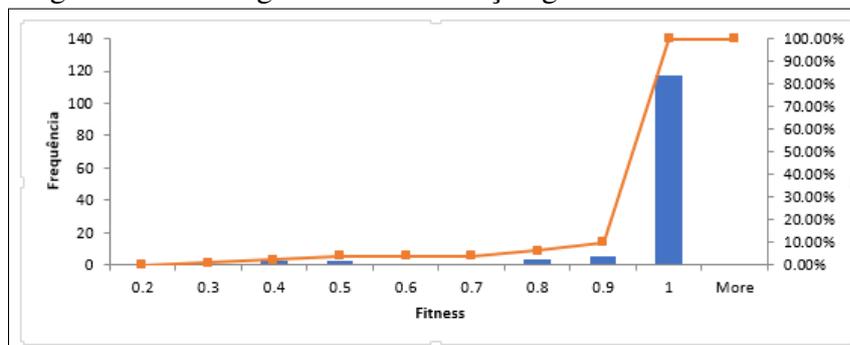
Fonte: (O autor)

5.2 Desempenho Geral do Micro-Algoritmo Genético

Como já mencionado neste estudo, a simulação multidimensional de escoamentos reativos tem um custo computacional elevado, portanto, devido a sua complexidade não pode ser concluída em um período de tempo curto. Os $\mu - AG's$ apresentam um tempo de operação reduzido ao serem comparados com algoritmos genéticos tradicionais, entretanto, tais métodos ainda podem demorar bastante até atingir o resultado final. Visto isso, até o momento do desenvolvimento deste estudo, o processo de otimização aplicado não foi encerrado. Porém, pode-se observar o funcionamento adequado do algoritmo a partir das 3 gerações já convergidas, as quais atingiram resultados satisfatórios que serão discutidos adiante.

A partir da variação dos parâmetros de entrada definidos, torna-se possível uma combinação de até 15.360 indivíduos. As 3 gerações convergidas geraram um total de 130 indivíduos, dos quais 52 são distintos (0.34% das combinações possíveis), ou seja, não se repetem. Segundo a seção de Metodologia, o resultado da função de avaliação selecionada deve se encontrar no intervalo entre 0 e 1. O menor valor de *fitness* obtido nos resultados foi de 0,2611262, enquanto o maior valor foi de 0,9868144. Portanto, pode-se afirmar que o algoritmo foi capaz de gerar soluções em uma grande amplitude. A Figura 29 mostra o histograma da distribuição dos 130 indivíduos obtidos. As barras mostram quantos indivíduos se encontram em cada intervalo e a linha representa a quantidade acumulada de indivíduos. O valor médio das avaliações dos indivíduos foi de 0,935986799 e o desvio padrão das amostras foi 0,121446845. Tais valores condizem com a Figura 29, a qual ilustra que a maior parte dos valores se encontra no intervalo entre 0,9 e 1, sendo este um padrão de distribuição semelhante em todas as gerações analisadas. Um maior detalhamento dessa distribuição pode ser observado na Tabela 6.

Figura 29 – Histograma da distribuição geral de indivíduos



Fonte: (O autor)

Tabela 6 – Distribuição geral de indivíduos.

<i>Fitness</i>	Nº de indivíduos
0 - 0,2	0
0,2 - 0,3	1
0,3 - 0,4	2
0,4 - 0,5	2
0,5 - 0,6	0
0,6 - 0,7	0
0,7 - 0,8	3
0,8 - 0,9	5
0,9 - 1,0	117

Fonte: O autor

5.2.1 Geração 1

A primeira geração convergiu após 9 populações, somando 45 indivíduos, dos quais 18 são distintos. A Tabela 7 mostra a distribuição de indivíduos por intervalo de *fitness* na Geração 1. Todos os indivíduos desta geração possuem um *fitness* maior que 0.8, de modo que esta é a geração com o maior valor médio de avaliação (0,967639238). O desvio padrão entre as avaliações dos indivíduos desta população é baixo (0,030227304). É importante pontuar que nessa geração, assim como nas outras duas analisadas, o valor para o qual se convergiu não foi o maior valor gerado. Essa situação ocorre porque o maior valor de uma população é replicado diretamente na seguinte, sem passar pelo processo de seleção por torneio, seguido de reprodução. A seleção por torneio torna possível que um mesmo indivíduo se torne progenitor mais de uma vez, de modo que mais de um indivíduo da geração seguinte possua parte de seus *bits*. Uma vez que a convergência ocorre a partir da presença dos mesmos *bits* em uma determinada porcentagem da população, é comum convergir-se para indivíduos advindos do processo de seleção e não do maior valor presente. Tendo isso em vista, o indivíduo para qual se convergiu apresentou um *fitness* de 0,9852896, enquanto o indivíduo mais bem avaliado apresentou um *fitness* de 0,9868144. Os valores dos parâmetros iniciais para cada um desses indivíduos está ilustrado na Tabela 8.

Vale ressaltar que o indivíduo convergido, ao não apresentar o maior valor observado na geração, pode desaparecer em algumas populações. A Figura 30 ilustra a parcela de cada população composta por esse indivíduo. Na convergência da geração, observou-se que quatro dos cinco indivíduos da população eram idênticos. De maneira semelhante, a Figura 31 mostra a frequência do valor de convergência do *fitness* e dos 4 parâmetros de entrada ao longo das populações.

Tabela 7 – Distribuição de indivíduos na Geração 1.

<i>Fitness</i>	<i>Nº</i> de indivíduos
0 - 0,2	0
0,2 - 0,3	0
0,3 - 0,4	0
0,4 - 0,5	0
0,5 - 0,6	0
0,6 - 0,7	0
0,7 - 0,8	0
0,8 - 0,9	1
0,9 - 1,0	44

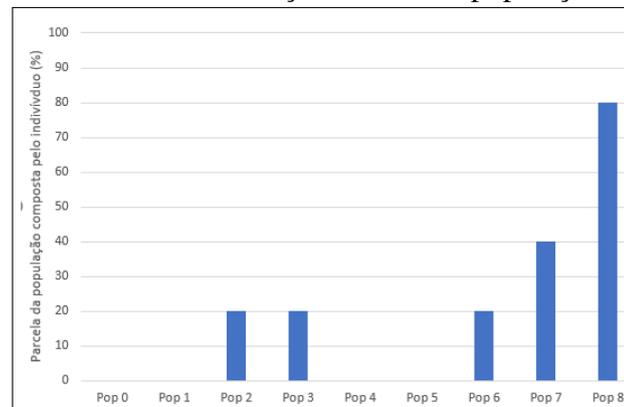
Fonte: O autor

Tabela 8 – Parâmetros dos indivíduos convergidos e mais bem avaliados na Geração 1.

<i>Indivíduo</i>	<i>Fitness</i>	<i>Swirl</i>	<i>Ca1inj</i>	<i>Combkk</i>	<i>Combkn</i>
Convergido	0.9852896	1.25	-5.65	0.007	6
Mais Bem Avaliado	0.9868144	0.75	-5.8	0.012	7

Fonte: (O autor)

Figura 30 – Presença do indivíduo convergido na Geração 1 em suas populações.



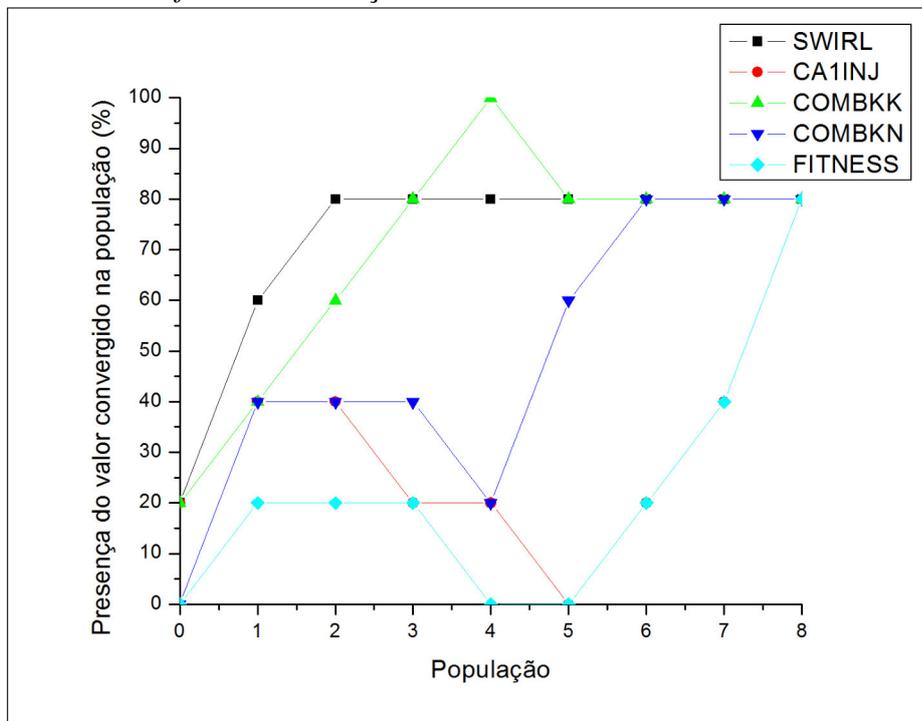
Fonte: (O autor)

5.2.2 Geração 2

Dentre as três gerações, a segunda alcançou, após apenas sete populações, a convergência mais rápida. Esta geração é composta por 35 indivíduos, sendo 16 distintos entre si. A Tabela 9 ilustra a sua distribuição. As avaliações obtidas nesta geração apresentaram grande amplitude e torna-se importante pontuar que nela apareceram os menores valores de *fitness* (0,2611262 e 0,3508335). É válido ressaltar que o cromossomo com menor valor de avaliação foi gerado por pais que possuem *fitness* mais elevados, validando o papel do modelo de reprodução para o aumento da variabilidade dos indivíduos. O valor médio de avaliação foi 0.881091334 e seu desvio padrão 0.190740897. Uma informação válida a ser destacada é que um indivíduo

idêntico ao melhor avaliado na Geração 1 também foi o melhor avaliado nesta geração. Portanto, apenas o indivíduo convergido é retratado na Tabela 10. A Figura 33 ilustra a frequência do valor de convergência dos parâmetros no decorrer das populações. A partir da comparação desta geração com as demais, pode-se observar que a velocidade de convergência de uma geração não é, necessariamente, relacionada com a similaridade entre as avaliações dos indivíduos da população inicial e nem com a elevação do valor médio de tal grupo, uma vez que a Geração 2 convergiu mais rapidamente que as outras duas.

Figura 31 – Ilustração da convergência dos parâmetros de entrada e do *fitness* na Geração 1



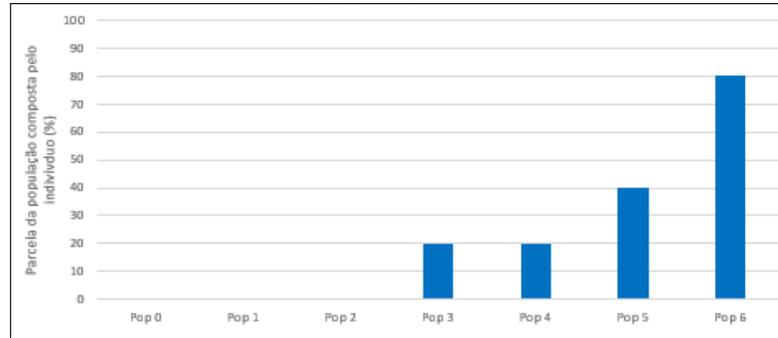
Fonte: (O autor)

Tabela 9 – Distribuição de indivíduos na Geração 2.

<i>Fitness</i>	<i>Nº</i> de indivíduos
0 - 0,2	0
0,2 - 0,3	1
0,3 - 0,4	1
0,4 - 0,5	2
0,5 - 0,6	0
0,6 - 0,7	0
0,7 - 0,8	2
0,8 - 0,9	2
0,9 - 1,0	27

Fonte: (O autor)

Figura 32 – Presença do indivíduo convergido na Geração 2 em suas populações.



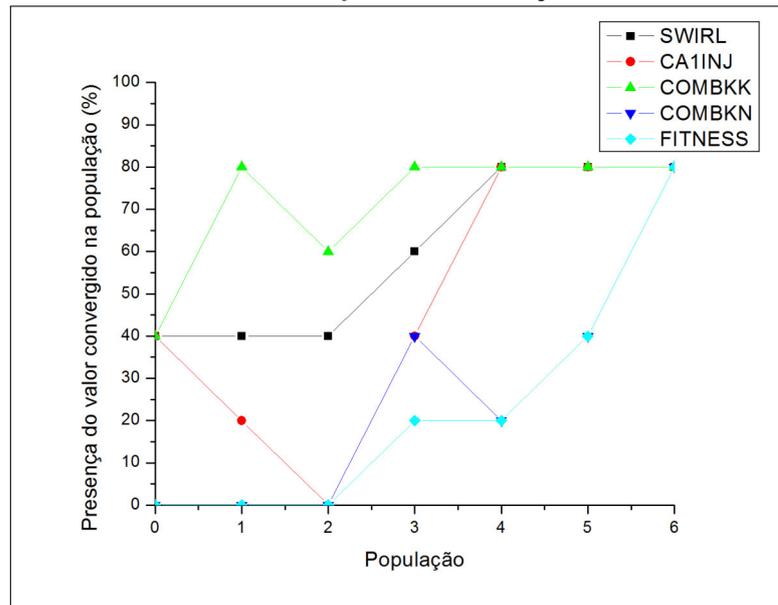
Fonte: (O autor)

Tabela 10 – Parâmetros do indivíduo convergido na Geração 2.

Indivíduo	Fitness	Swirl	Ca1inj	Combkk	Combkn
Convergido	0.9853594	2.25	-5.5	0.02	9.5

Fonte: (O autor)

Figura 33 – Ilustração da convergência dos parâmetros de entrada e do fitness na Geração 2



Fonte: (O autor)

5.2.3 Geração 3

A última geração analisada é composta por 50 indivíduos distribuídos entre 10 populações, demonstrando, portanto, o processo de convergência mais lento. Dos 50 cromossomos que compõem esta geração 22 são distintos entre si. Entretanto, pode-se observar, nesta geração, um fenômeno inédito: Dentre os 22 indivíduos distintos, apenas 20 valores de avaliação diferentes são observados. Em duas situações diferentes, pares de cromossomos ilustrados na

tabela que se diferem apenas pelo valor do parâmetro *swirl* apresentaram o mesmo valor da função de avaliação. Isto é possível pois, a avaliação de um indivíduo é determinada a partir de um coeficiente de determinação da curva de taxa de liberação de energia. A distribuição de cromossomos é ilustrada na Tabela 11. O valor médio da avaliação dos indivíduos é 0.94592643 e o seu desvio padrão é 0.090545095. Mais uma vez o indivíduo para o qual se convergiu não foi o qual obteve a melhor avaliação. Ambos cromossomos estão, respectivamente, retratados na Tabela 12. A frequência do cromossomo convergido nas populações é ilustrada na Figura 34. A Figura 35 ilustra a frequência do valor de convergência dos parâmetros na Geração 3. Nesta geração, destaca-se o fato de a convergência não ter sido atingida, imediatamente, ao 80% de uma população ser composta por indivíduos com a mesma avaliação. Isso ocorre, pois, nessa geração, houveram ocorrências em que cromossomos com alguns *bits* distintos apresentaram o mesmo *fitness*. Deve-se lembrar que o fator que caracteriza a convergência é o sequenciamento de 95% de *bits* idênticos em todos os indivíduos da população e não apenas a aparição da mesma avaliação na maior parcela dos cromossomos. Portanto, observa-se que, após a convergência para uma mesma avaliação, ainda foram necessárias duas populações para se atingir a convergência completa. Desse modo, pode-se afirmar que o $\mu - AG$ funcionou como o esperado no processo de convergência e encerramento de uma geração.

Tabela 11 – Distribuição de indivíduos na Geração 3.

<i>Fitness</i>	<i>Nº</i> de indivíduos
0 - 0.2	0
0.2 - 0.3	0
0.3 - 0.4	1
0.4 - 0.5	2
0.5 - 0.6	0
0.6 - 0.7	0
0.7 - 0.8	1
0.8 - 0.9	2
0.9 - 1.0	46

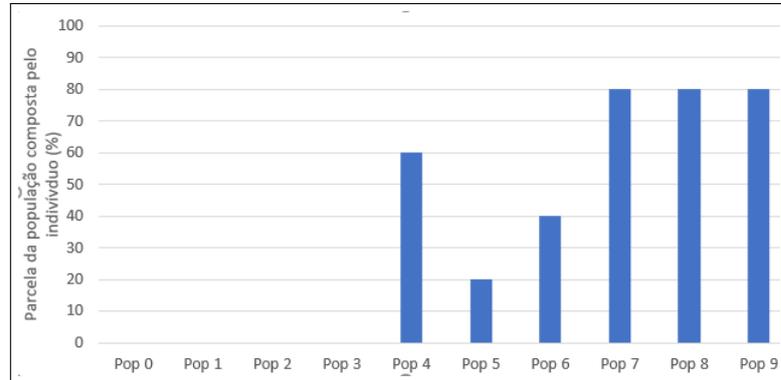
Fonte: (O autor)

Tabela 12 – Parâmetros dos indivíduos convergido e mais bem avaliado na Geração 3.

<i>Indivíduo</i>	<i>Fitness</i>	<i>Swirl</i>	<i>Ca1inj</i>	<i>Combkk</i>	<i>Combkn</i>
Convergido	0.9711945	1.25	-5.8	0.007	6,5
Mais bem avaliado	0.9754732	1.75	-5.7	0.008	6,5

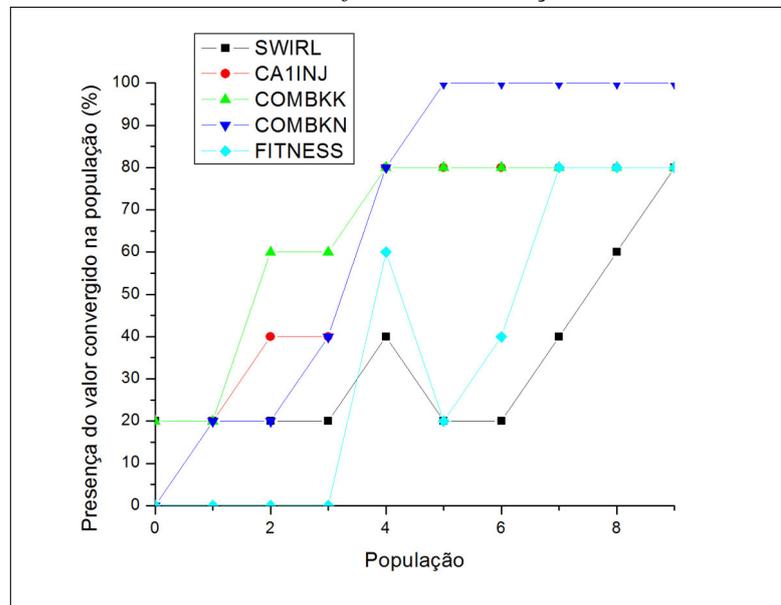
Fonte: (O autor)

Figura 34 – Presença do indivíduo convergido na Geração 3 em suas populações.



Fonte: (O autor)

Figura 35 – Ilustração da convergência dos parâmetros de entrada e do *fitness* na Geração 3



Fonte: (O autor)

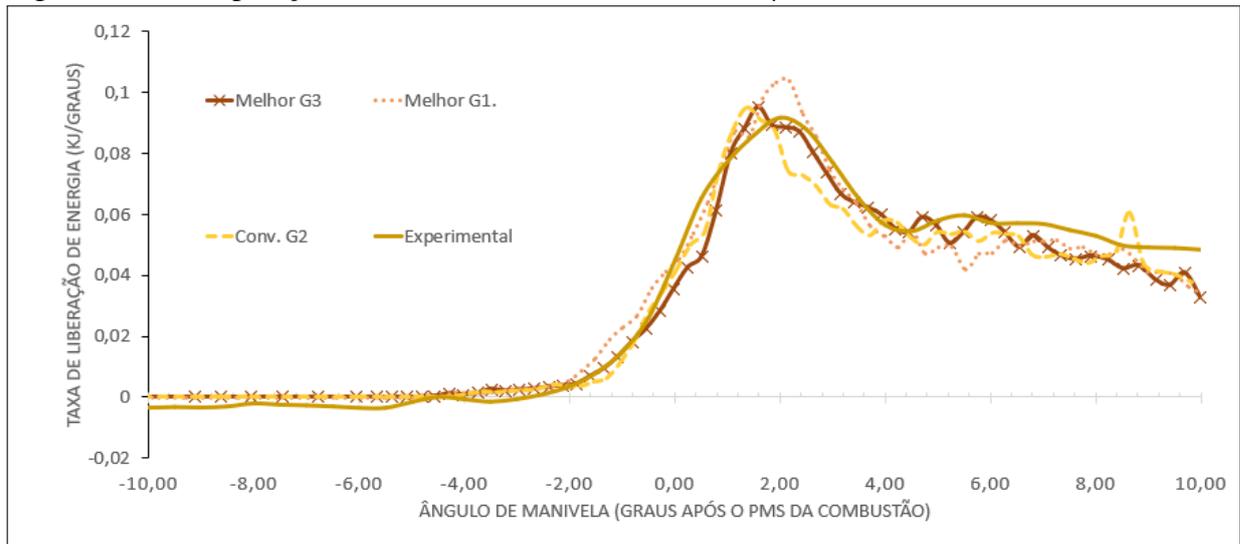
5.2.4 Comparação de resultados do μ – AG

Os resultados das melhores avaliações encontradas em cada geração estão ilustrados na Figura 36. Na imagem, é possível observar que as curvas plotadas a partir dos resultados obtidos no fim de cada geração são semelhantes à curva que representa os dados experimentais.

Conforme já discutido, o indivíduo que obteve melhor avaliação ocorreu na Geração 1. É importante pontuar que tal cromossomo foi oriundo da geração inicial aleatória de indivíduos. Devido à estratégia elitista adotada, tal indivíduo passou pelas populações sem ser submetido aos métodos de seleção e reprodução; sem transmitir, por consequência, seus *bits* a outros cromossomos. Tendo em vista que, até o momento de desenvolvimento deste estudo, nenhuma

avaliação foi capaz de superar a de um cromossomo gerado na primeira população, o micro-algoritmo genético implementado ainda não pode ser caracterizado como um processo de otimização. Entretanto, esse fato não caracteriza um mau funcionamento do $\mu - AG$, pois, diversos resultados condizentes com os dados experimentais foram gerados, apesar de não apresentarem melhor classificação que o indivíduo comentado. Ademais, o algoritmo foi capaz de gerar soluções variadas dentro de um grande intervalo, conforme é esperado deste tipo de ferramenta.

Figura 36 – Comparação dos resultados obtidos através do $\mu - AG$



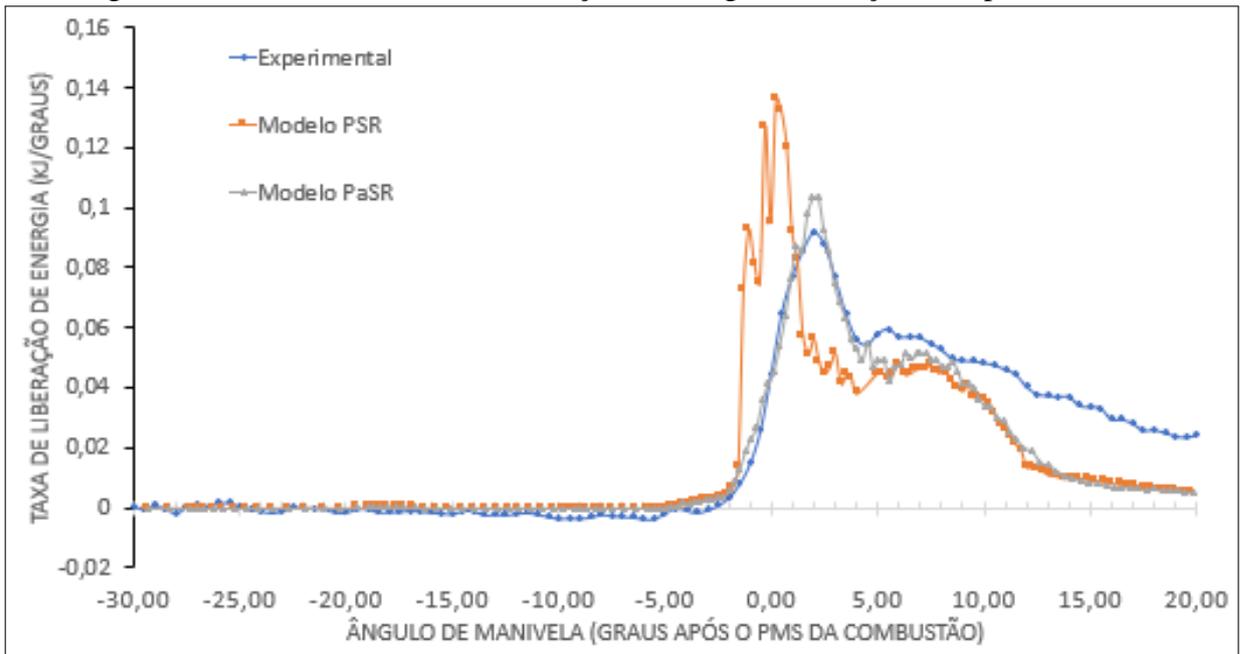
Fonte: (O autor)

5.3 Curvas da taxa de liberação de energia e de pressão no interior do cilindro

As curvas da taxa de liberação de energia e de pressão no interior do cilindro, para o indivíduo com melhor avaliação, estão ilustradas respectivamente nas figuras 37 e 38. Os parâmetros de entrada utilizados no $\mu - AG$, nesse caso, estão ilustrados na Tabela 8. Além dessas, também são ilustradas as curvas obtidas a partir dos dados experimentais e da simulação que utiliza o modelo *PSR*. Em ambas as simulações é possível observar, de maneira bem definida, as fases pré-misturada e difusiva da combustão.

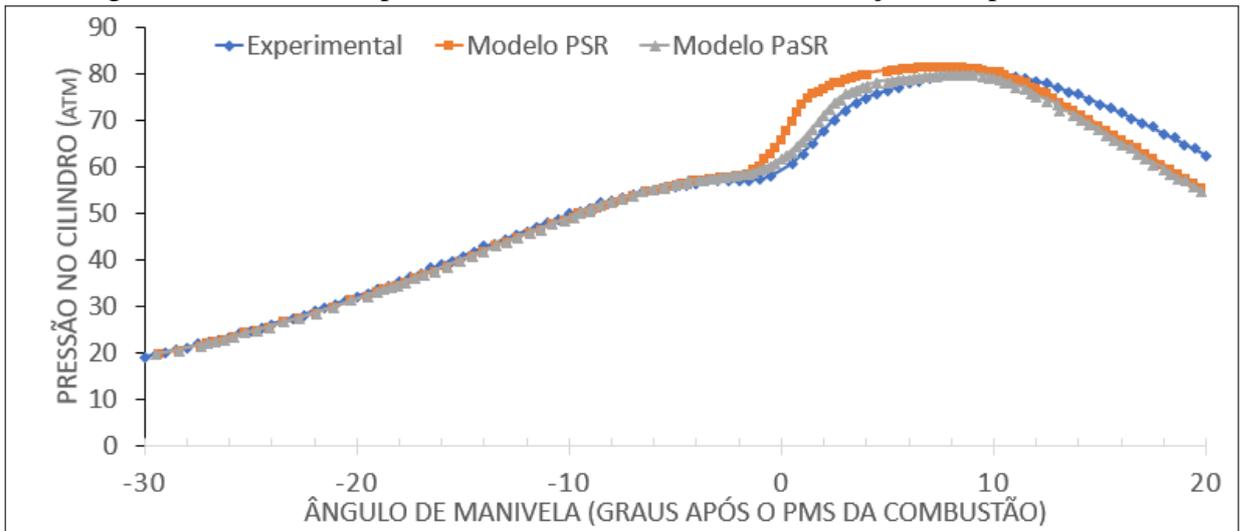
A partir da análise das curvas das taxas de liberação de energia, percebe-se que ambos os modelos se comportam de maneira muito semelhante na parcela inicial da simulação. Valores significativos de energia liberada começam a ser visualizados a partir de $-4,7^\circ$ antes do PMS. Essa liberação está relacionada ao início das reações de formação de radicais que precedem a queima do combustível. Visto que nenhum modelo de ignição foi aplicado neste

Figura 37 – Curvas das taxas de liberação de energia: simulações e experimental



Fonte: (O autor)

Figura 38 – Curvas de pressão no interior do cilindro: simulações e experimental



Fonte: (O autor)

estudo, sendo esse fenômeno, então, controlado pelo progresso das reações químicas, e que o mesmo mecanismo de reações foi utilizado para as duas simulações, é de se esperar que esta zona seja semelhante nos dois casos, condizendo, portanto, com os resultados obtidos. Tal semelhança é mantida até, aproximadamente, $-1,3^\circ$ antes do PMS. Nesse ponto, a taxa de liberação de energia do modelo *PSR* já apresenta valor quatro vezes maior que o obtidos pelo *PaSR*. Além disso, observando a Figura 38, é possível afirmar que, no momento da injeção ($-5,8^\circ$ antes do PMS), a pressão no interior do cilindro se mantém dentro do intervalo entre 50 e 100 atm definido pela literatura (HEYWOOD, 1988).

As maiores discrepâncias entre os resultados obtidos são observadas na fase pré-misturada da combustão. Nesse período, a taxa de liberação de energia do modelo *PSR* evolui de maneira brusca, atingindo seu pico cerca de dois graus de manivela antes do caso experimental. Além disso, tal pico atingiu um valor 48,4% maior que o obtido a partir dos dados do experimento. Os efeitos da liberação abrupta de energia também podem ser visualizados na curva de pressão no cilindro. Observando as equações 4.1 e 4.2, pode-se afirmar que, ao se aumentar a influência da turbulência sobre as reações, o progresso da combustão deve ocorrer de forma mais lenta. Tal hipótese é confirmada pela curva de taxa de liberação de energia do caso que utiliza o modelo *PaSR*. Nesse caso, o crescimento da curva é freado, aproximando-se mais dos valores experimentais. Ademais, o pico da taxa de liberação de energia obtido ocorre em $-2,2^\circ$ após o PMS, defasando-se, portanto, em apenas 0,2 graus de manivela do valor do experimento. Apesar da influência da turbulência sobre o progresso da combustão, o valor máximo da taxa de liberação de energia também é superestimado nesse caso, superando em 13,3% os valores obtidos em ambiente laboratorial. Isso posto, é possível afirmar que a fase pré-misturada da combustão possui altos valores para o número de Damkohler e que, portanto, a aplicação de um modelo de combustão capaz de descrever a participação da turbulência no progresso das reações químicas é de grande valor para esse estágio.

Segundo Heywood (1988), o início da fase difusiva da combustão pode ser estimado como o ponto mínimo antes da inclinação acentuada da curva da taxa de liberação de energia, após o pico da combustão pré-misturada. Portanto, a partir da observação da Figura 37 é possível afirmar que o início dessa fase foi estimado precocemente pelo modelo *PSR* e de maneira tardia pelo modelo *PaSR*. Apesar da defasagem no início da fase, os valores das taxas de liberação de energia dos casos simulados se mantiveram, relativamente, próximos entre si. Tal proximidade permite afirmar que a turbulência exerce pouco efeito sobre o progresso da combustão nessa fase, caracterizando, portanto, uma região com baixo número de Damkohler. Os valores das taxas de liberação de energia de ambas as simulações se mostrou inferior aos obtidos experimentalmente durante toda a fase difusiva. Além disso, a partir de 10° após o PMS, as taxas de liberação de energia de ambos os casos modelados caem abruptamente, tornando-se destoantes dos dados experimentais. Desse modo, pode-se inferir que nenhum dos modelos implementados foi capaz de descrever a combustão tardia de maneira correta. Resultados mais próximos da realidade são possíveis a partir da utilização de mecanismos de reações mais complexos e de simulações mais detalhadas. Entretanto, tais alternativas estão atreladas a um aumento do custo computacional da

simulação.

6 CONCLUSÃO

Após a análise dos resultados descrita no capítulo anterior, é possível afirmar que o $\mu - AG$ implementado cumpriu o objetivo específico de gerar simulações diversas a partir da variação dos parâmetros de entrada selecionados, pois 52 resultados distintos foram obtidos no decorrer de três gerações de indivíduos. A função de avaliação selecionada exerceu seu papel, de maneira eficiente, e se mostrou capaz de discriminar entre soluções boas, intermediárias e ruins. A variação dos quatro parâmetros de entrada selecionados gerou indivíduos dentro de uma grande amplitude de valores de avaliação, confirmando sua influência direta sobre o processo de combustão. Os dois parâmetros advindos da adaptação do modelo de combustão turbulenta tiveram seus valores ajustados. Bons resultados foram obtidos com maiores valores para o expoente do fator de atraso (C_{kn}), os quais retardam a atuação da turbulência sobre as reações químicas, permitindo, portanto, que o progresso das reações não seja demasiadamente freado. Entretanto, apesar dos resultados obtidos a partir aplicação do $\mu - AG$ terem se mostrado satisfatórios, até o momento de desenvolvimento deste trabalho, essa ferramenta não demonstrou ser efetiva como método de otimização, pois o melhor resultado apresentado foi obtido na geração aleatória de indivíduos ao início da primeira geração desenvolvida. Novos bons resultados podem ser obtidos a partir de um aumento do número de simulações geradas pelo algoritmo.

O segundo objetivo específico e o objetivo geral foram atingidos a partir da análise das curvas de taxa de liberação de energia e de pressão no interior do cilindro do indivíduo que obteve a melhor avaliação pelo $\mu - AG$. Foi possível observar que a utilização de um modelo que descreve a influência da turbulência sobre a combustão aproximou bastante os resultados da simulação dos resultados experimentais. A fase pré-misturada da combustão obtida pelo modelo *PaSR* se apresentou de forma mais realista que o modelo *PSR*, o crescimento da taxa de liberação de energia se deu de uma maneira menos abrupta e seu pico atingiu um valor menor, distanciando-se dos valores experimentais em apenas 13%, ao invés dos 48% vistos no modelo *PSR*. Além disso, também é válido ressaltar que o pico da taxa de liberação de energia na fase pré-misturada obtido pela aplicação do modelo *PaSR*, mostrou-se defasado dos dados experimentais por apenas 0,2 graus do ângulo de manivela. Os resultados apresentados para a fase difusiva da combustão mostraram valores próximos em ambos os modelos, confirmando que o modelo adaptado também é capaz de descrever períodos governados pela cinética química.

REFERÊNCIAS

- ABRAHAM, J.; BRACCO, F.; REITZ, R. Comparisons of computed and measured premixed charge engine combustion. **Combustion and Flame**, v. 60, n. 3, p. 309 – 322, 1985. ISSN 0010-2180.
- AMSDEN, A. A. **Kiva-3V: A Block-Structured KIVA Program for Engines with Vertical or Canted Valves**. New Mexico: Los Alamos National Laboratory, 1997.
- ANDERSON, D.; TANNEHILL, J. C.; PLETCHER, R. H. **Computational fluid mechanics and heat transfer**. [S.l.]: CRC Press, 2016.
- BAUMGARTEN, C. **Mixture Formation in Internal Combustion Engines**. Berlin: Springer-Verlag, 2006. ISBN 978-3-540-30835-5.
- BRUNETTI, F. **Motores De Combustao Interna**. [S.l.]: EDGARD BLUCHER, 2012. ISBN 9788521207092.
- FOX, R. W.; MCDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J. **Introduction to Fluid Mechanics**. Sexta edição. [S.l.]: Wiley, 2003. ISBN 0471202312,9780471202318.
- GLASSMAN, I.; YETTER, R. A.; GLUMAC, N. G. **Combustion**. Quinta edição. Boston: Academic Press, 2015. ISBN 978-0-12-407913-7.
- GOLDBERG, D. E.; DEB, K. A comparative analysis of selection schemes used in genetic algorithms. In: **Foundations of genetic algorithms**. [S.l.]: Elsevier, 1991. v. 1, p. 69–93.
- GOLDBERG, D. E.; HOLLAND, J. H. Genetic algorithms and machine learning. **Machine learning**, Springer, v. 3, n. 2, p. 95–99, 1988.
- GOLOVITCHEV, V. I.; NORDIN, N.; JARNICKI, R.; CHOMIAK, J. 3-d diesel spray simulations using a new detailed chemistry turbulent combustion model. In: **SAE Technical Paper**. SAE International, 2000. Disponível em: <<https://doi.org/10.4271/2000-01-1891>>.
- HALSTEAD, M.; KIRSCH, L.; QUINN, C. The autoignition of hydrocarbon fuels at high temperatures and pressures—fitting of a mathematical model. **Combustion and Flame**, v. 30, p. 45 – 60, 1977. ISSN 0010-2180. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0010218077900505>>.
- HEYWOOD, J. B. **Internal Combustion Engines Fundamentals**. Nova York: McGraw-Hill, 1988. ISBN 978-0-07-100499-2.
- HOMAIFAR, A.; LAI, H.; MCCORMICK, E. System optimization of turbofan engines using genetic algorithms. **Applied Mathematical Modelling**, v. 18, n. 2, p. 72 – 83, 1994. ISSN 0307-904X. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0307904X94901627>>.
- IYODA, E. M. **INTELIGÊNCIA COMPUTACIONAL NO PROJETO AUTOMÁTICO DE REDES NEURAIS HÍBRIDAS E REDES NEUROFUZZY HETEROGÊNEAS**. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas, 2000.
- JONES, W.; LAUNDER, B. E. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. **International journal of heat and mass transfer**, Elsevier, v. 15, n. 2, p. 301–314, 1972.

- KEE, R.; RUPLEY, F.; MILLER, J. **Chemkin-II: A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics**. Livermore, 1989. Disponível em: <<https://ntrl.ntis.gov/NTRL/dashboard/searchResults/titleDetail/DE90000917.xhtml>>.
- KOLMOGOROV, A. N. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. In: **Dokl. Akad. Nauk SSSR**. [S.l.: s.n.], 1941. v. 30, n. 4, p. 299–303.
- KRISHNAKUMAR, K. Micro-genetic algorithms for stationary and non-stationary function optimization. In: INTERNATIONAL SOCIETY FOR OPTICS AND PHOTONICS. **Intelligent Control and Adaptive Systems**. [S.l.], 1990. v. 1196, p. 289–297.
- KUO, K. K.-y.; ACHARYA, R. **Fundamentals of turbulent and multiphase combustion**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2012.
- LAUNDER, B.; SPALDING, D. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, n. 2, p. 269 – 289, 1974. ISSN 0045-7825. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0045782574900292>>.
- LEFEBVRE, A.; MCDONELL, V. **Atomization and Sprays**. Segunda edição. Boca Raton: CRC Press, 2017. ISBN 9781498736268.
- LIBBY, P. A.; WILLIAMS, F. A. Turbulent reacting flows. **Turbulent reacting flows**, 1980.
- LINDEN, R. **Algoritmos genéticos (2a edição)**. [S.l.]: Brasport, 2008.
- MAGNUSSEN, B.; HJERTAGER, B. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. **Symposium (International) on Combustion**, v. 16, n. 1, p. 719 – 729, 1977. ISSN 0082-0784. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0082078477803664>>.
- MERKER, G.; SCHWARZ, C.; STIESCH, G.; OTTO, F. **Simulating Combustion: Simulation of combustion and pollutant formation for engine-development**. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 2005. ISBN 9783540306269.
- MWM INTERNATIONAL MOTORES. **MWM Sprint**: Manual de oficina. São Paulo, 2001. 166 p.
- NIEUWSTADT, F. T.; WESTERWEEL, J.; BOERSMA, B. J. **Turbulence: Introduction to Theory and Applications of Turbulent Flows**. Primeira edição. [S.l.]: Springer International Publishing, 2016. ISBN 978-3-319-31597-3,978-3-319-31599-7.
- NORDIN, P. A. N. **Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion**. Tese (Doutorado) — Chalmers University of Technology, Gotemburgo, 2001.
- O'ROURKE, P. J.; AMSDEN, A. A. The tab method for numerical calculation of spray droplet breakup. In: **SAE Technical Paper**. SAE International, 1987. Disponível em: <<https://doi.org/10.4271/872089>>.
- PATTERSON, M. A.; KONG, S.-C.; HAMPSON, G. J.; REITZ, R. D. Modeling the effects of fuel injection characteristics on diesel engine soot and nox emissions. In: **International Congress Exposition**. SAE International, 1994. ISSN 0148-7191. Disponível em: <<https://doi.org/10.4271/940523>>.

- PETERS, N. **Turbulent combustion**. [S.l.]: Cambridge university press, 2000.
- POINSOT, T.; VEYNANTE, D. **Theoretical and Numerical Combustion**. Segunda edição. Philadelphia: Edwards, 2005. ISBN 1-930217-10-2.
- POPE, S. B. **Turbulent flows**. [S.l.]: IOP Publishing, 2001.
- REITZ, R. D. Computer modeling of sprays. **Spray Technology Short Course, Pittsburgh, PA**, 1996.
- REITZ, R. D.; DIWAKAR, R. Effect of drop breakup on fuel sprays. In: **SAE Technical Paper**. SAE International, 1986. Disponível em: <<https://doi.org/10.4271/860469>>.
- REZENDE, A. L. T. Análise numérica da bolha de separação do escoamento turbulento sobre placa plana fina inclinada. 2009.
- RUSSELL, S. J.; NORVIG, P. **Artificial intelligence: a modern approach**. [S.l.]: Malaysia; Pearson Education Limited,, 2016.
- SALAUN, E.; APELOIG, J.; GRISCH, F.; YVONNET, C.-E.; NICOLAS, B.; DIONNET, F. Optical investigation of ignition timing and equivalence ratio in dual-fuel cng/diesel combustion. In: **SAE Technical Paper**. SAE International, 2016. Disponível em: <"<https://doi.org/10.4271/2016-01-0772>">.
- SCHLICHTING, H. *et al.* **Boundary-layer theory**. [S.l.]: Springer, 1974.
- SENECAL, P. K. Numerical optimization using the gen4 micro-genetic algorithm code. **University of Wisconsin-Madison**, 2000.
- SILVA, D. C. **Aplicação de modelo de cinética química reduzida em simulações multidimensionais de motores diesel**. 2018. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharel em Engenharia Mecânica), UFC (Universidade Federal do Ceará), Fortaleza, Brasil.
- SOLANKI, S. A.; PATEL, D. R.; PARIKH, K. B.; VASAN, G. Numerical models of diesel spray characteristics at secondary break up stage. **International Journal of Advanced Engineering Research and Studies, IJAERS**, v. 2, p. 01–04, 2013.
- STIESCH, G. **Modeling Engine Spray and Combustion Processes**. Berlin: Springer-Verlag, 2003. ISBN 978-3-662-08790-9.
- URNS, S. **An introduction to combustion: concepts and applications**. [S.l.]: McGraw-Hill, 2013. (McGraw-Hill series in mechanical engineering). ISBN 9780079118127.
- VERSTEEG, H.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**. Segunda edição. Harlow: Pearson Education Limited, 2007. ISBN 978-0-13-127498-3.
- WARNATZ, J.; MAAS, U.; DIBBLE, R. W.; WARNATZ, J. **Combustion**. [S.l.]: Springer, 1996. v. 3.
- WIERZBA, A. Deformation and breakup of liquid drops in a gas stream at nearly critical weber numbers. **Experiments in Fluids**, v. 9, n. 1, p. 59–64, Jan 1990. ISSN 1432-1114. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF00575336>>.

WILCOX, D. C. **Turbulence Modeling for CFD (Third Edition)**. Terceira edição. [S.l.]: Dcw Industries, Incorporated, 2006. ISBN 1928729088,9781928729082.

XIN, J.; MONTGOMERY, D.; HAN, Z.; REITZ, R. Multidimensional modeling of combustion for a six-mode emissions test cycle on a di diesel engine. **Journal of engineering for gas turbines and power**, American Society of Mechanical Engineers, v. 119, n. 3, p. 683–691, 1997.


```

44     lenidv = 30 + nspp1
45     call xsetfdv(0)                                     If 0,
         messages from VODE are suppressed
46 ! -----
47     do 50 i4t = initc, iendc
48         i4 = ckhotvec(i4t)
49 ! --- Cell values initialization -----
50         do 10 isp = 1, nsp
51             10     conc(isp) = max(0., spd(i4,isp)*rmw(isp)) !Concentrations
52                 temp0 = temp(i4)                            !Cell initial temperature
53                 temp1 = temp0                                !Cell final temperature
54                 call ckcty(conc, ickwrk, rckwrk, yfrac)      !Mass fractions
55                 call ckcvbs(temp1, yfrac, ickwrk, rckwrk, cvmean) !Mean cv
56 ! -----
57 ! --- Common variables initialization -----
58 ! ----- Rho times specific heat at constant volume -----
59         rhotcv = ro(i4)*cvmean                             ro(i4)*
         cv_mean
60 ! ----- Delay factor -----
61         rcomplnum = max(0., sum(spd(i4, :)*cho)/ro(i4) - ychoi) * Different
         from Xin et al
62         rcomplden = 1. - spd(i4, ckn2kk)/ro(i4)
63         rcompl = rcomplnum/rcomplden !Combustion completeness
64         fdelay = min(1., ((1. - exp((-1.)*rcompl))/0.632)**cmk(2)) !Delay factor
65 ! ----- Turbulent time (PaSR) -----
66         epsden = eps(i4)
67         if (epsden .eq. 0.) epsden = 1.
68         tautrb = cmk(1)*tke(i4)/epsden ! Turbulent time
69 ! ----- Equilibrium concentrations -----
70         if (.not. associated(conceq)) allocate(conceq(nsp))
71         if (fdelay*tautrb .gt. 0.) then
72             pcgs = sum(conc)*8.3143e+7*temp0
73             call ceq_state(sys, N = conc, p_cgsgs = pcgs,
74                 1             T = temp0, N_eq = conceq, info = iret)
75         endif
76 ! --- Calling VODE -----
77         cktime = 0.; iter = 1; istate = 1; ickwrkdv = 0; rckwrkdv = 0.
78         rckwrkdv(5) = 1.d-20
79         yfuncback = yfunc !Backup in case of restarting
80     20     continue
81         call dvode(pasrmodel, nspp1, yfunc, cktime, dt, itol, rtol, atol,
82             1     itask, istate, iopt, rckwrkdv, lenrdv, ickwrkdv, lenidv, jac,
83             2     mmf, rckwrk, ickwrk)
84         if (istate .eq. -1) istate = 2
85         if (istate .eq. -5 .or. istate .eq. -4) then
86             if (iopt .eq. 0) iopt = 1
87             if (iopt .eq. 1) rckwrkdv(5) = rckwrkdv(5)/10.
88             if (rckwrkdv(5) .ge. 1.d-25) then
89                 cktime = 0.

```



```

185         isp = cm(kk, ir)
186         if (isp .eq. 0) go to 10
187         if (conc(isp) .le. 0.) go to 10
188         rom = qwsr*fbmam(isp, ir)/conc(isp)
189         if(rom .ge. 0.) go to 10
190         if(rom .lt. rmin) iref = isp
191         rmin = min(rmin, rom)
192     10 continue
193 ! ----- Calculating reaction progress -----
194 !         The rate of change of concentration of the reference
195 !         species is calculated using:
196 !         omegadot_{ref, pasr} = omegadot_{ref, wsr} * K
197 !         Where K is:
198 !          $K = \tau_{chem} / (\tau_{chem} + f_{delay}^{C2} * C1 * k / \epsilon)$ 
199 !         tau_chem is:
200 !          $\tau_{chem} = - (c_{ref} - c^*_{ref}) / \text{omegadot}_{\{ref, wsr\}}$ 
201 !         And c*_ref stands for the equilibrium concentration of the
202 !         reference species.
203 !         However, to assure mass conservation, the reaction rate is
204 !         calculated from omegadot_{ref, pasr} and the rate of the
205 !         species of the reaction ir are calculated using this
206 !         adjusted reaction rate. Since:
207 !          $\text{omegadot}_{\{ref, wsr\}} = (\nu_{\{ref, ir\}} - \nu_{\{ref, ir\}}) * q_{\{wsr, ir\}}$ 
208 !         And:
209 !          $q_{\{wsr, ir\}} = \text{omegadot}_{\{ref, wsr\}} / (\nu_{\{ref, ir\}} - \nu_{\{ref, ir\}})$ 
210 !         Analogously:
211 !          $q_{\{pasr, ir\}} = \text{omegadot}_{\{ref, pasr\}} / (\nu_{\{ref, ir\}} - \nu_{\{ref, ir\}})$ 
212     tauchem = (conceq(iref) - conc(iref))/fbmam(iref, ir)/qwsr      tau_chem = -
        (c_ref - c*_ref)/omega_{ref, reaction}
213     pasrk = tauchem/(tauchem + ftaut)                                pasrk =
        tau_chem/(tau_chem + fdelay^n * Constant * k/epsilon)
214     if (tauchem .lt. 0.) pasrk = 1.                                If tau_chem <
        0, the WSR model is considered
215     qpasr = qwsr*pasrk
216 ! -----
217 ! ----- Calculating rate of change of species concentration due to ir --
218     do 20 kk = 1, ckmaxsp
219         isp = cm(kk, ir)
220         if (isp .eq. 0) go to 20
221         omegadot(isp) = omegadot(isp) + fbmam(isp, ir)*qpasr
222     20 continue
223 ! -----
224     30 continue
225 ! -----
226     return
227     end

```

APÊNDICE B – CÓDIGO FONTE DO ALGORITMO GENÉTICO - ARQUIVO
MUGA.PY

```

1 from mugalib import *
2 from mugafit import *
3 genmax = 100
4 itrmax = 100
5 newterm = 0
6 def microga():
7     os.system( clear )
8     readinput()
9     outf = open( micro-ga.out , w )
10    desbits = 5 * [ ]
11    merits = 5 * [0.]
12    # Generations loop -----
13    elite = 0
14    for gen in range (0, genmax):
15        print (genheader + str(gen))
16        outf.write (genheader + str(gen) + \n )
17        outf.flush()
18        os.fsync(outf.fileno())
19        newgen (gen, gen - 1, elite)
20        for des in range (0, 5):
21            desbits[des] = createbits(gen, des)
22        for itr in range (0, itrmax):
23            print (itrheader + str(itr))
24            outf.write (itrheader + str(itr) + \n )
25            outf.flush()
26            os.fsync(outf.fileno())
27            print (header())
28            outf.write (header() + \n )
29            outf.flush()
30            os.fsync(outf.fileno())
31
32    # Getting merit values and finding elite design -----
33    elite = 0
34    for des in range (0, 5):
35        try:
36            bitstring = bit2str(desbits[des])
37            bankfile = bitsbank/ + bitstring
38            with open(bankfile, r ) as f:
39                merits[des] = readbank(desbits[des])
40        except FileNotFoundError:
41            start_run(gen, des, newterm)
42            merits[des] = merit_function(gen, des)
43            writebank(desbits[des], merits[des])
44    if (des != 0): # Finding the elite
45        if (merits[des] > merits[elite]):

```

```

46         elite = des
47         printdesign (desbits[des], merits[des], outf)
48         # -----
49         print ( elite: , elite)
50         # Checking convergence -----
51         samegen = False
52         for i in range (0, 5):
53             if (i != elite):
54                 bitstr1 = bit2str(desbits[i])
55                 for j in range (0, 5):
56                     if (j != elite and j != i):
57                         bitstr2 = bit2str(desbits[j])
58                         if (bitstr1 != bitstr2):
59                             samegen = True
60         # -----
61         if (samegen): # If the next iteration is using the same generation...
62             # Finding parents -----
63             randord = 4 * [-1]
64             for ind in range (0, 4):
65                 while (True):
66                     ran = random.randint(0, 4)
67                     if (not (any([x==ran for x in randord]) or ran==elite)):
68                         break
69                 randord[ind] = ran
70             parent1 = randord[0+(merits[randord[0]]<merits[randord[1]])]
71             parent2 = randord[2+(merits[randord[2]]<merits[randord[3]])]
72             # -----
73             # Creating children -----
74             bitspar1 = list(desbits[parent1])
75             bitspar2 = list(desbits[parent2])
76             createchild(bitspar1, bitspar2)
77             for des in range(0, 5):
78                 if (des != elite):
79                     desbits[des] = createchild(bitspar1, bitspar2)
80                     applybits(gen, des, desbits[des])
81             # -----
82         else:
83             break
84     outf.close()
85     return

```

APÊNDICE C – CÓDIGO FONTE DO ALGORITMO GENÉTICO - ARQUIVO
MUGAFIT.PY

```

1 from mugalib import *
2 from scipy.interpolate import interp1d
3 import matplotlib.pyplot as plt
4
5 print ( \n Merit: same dwchem from the experimental data. )
6
7 def merit_function(gen, design):
8     Merit function.
9     crankexp , dwchemexp = dwchemexp (gen, design)
10    crankkiva, dwchkiva = dwchemkiva(gen, design)
11    spexp = interp1d(crankexp, dwchemexp)
12    spkiva = interp1d(crankexp, dwchemexp)
13    plt.clf()
14    plt.plot(crankkiva, dwchkiva)
15    plt.plot(crankexp, spexp(crankexp))
16    ndata = size(crankkiva)
17    for i in range (0, ndata):
18        if (crankkiva[i] >= -19.):
19            init = i
20            break
21    plt.xlim(-20., 20.)
22    figpath = figs/gen + str(int(gen)) + _design + str(int(design))
23    plt.savefig(figpath)
24    meanexp = sum(spexp(crankkiva[init:]))/ndata
25    ssres = 0.
26    sstot = 0.
27    for i in range (init, ndata):
28        ssres += (spexp(crankkiva[i]) - dwchkiva[i])**2
29        sstot += (spexp(crankkiva[i]) - meanexp)**2
30    r2 = 1. - ssres/sstot
31    return (1. - abs(1. - r2))
32
33 def dwchemkiva(gen, design):
34     Gets the dwchem data.
35     path = gen_ + str(int(gen)) + \
36         /design_ + str(int(design)) + /run/
37     wchemstr = path + dat.thermo
38     wchem = getydy(wchemstr, 0, 7)
39     ndata = len(wchem[0])
40     crank = ndata * [0.]
41     dwchm = ndata * [0.]
42     for i in range(0, ndata):
43         crank[i] = wchem[0][i]
44         dwchm[i] = wchem[1][i]
45     return crank, dwchm

```

```
46
47 def dwchemexp(gen, design):
48     Gets dwchem from the experimental data.
49     path = gen_ + str(int(gen)) + \
50         /design_ + str(int(design)) + /run/
51     wchemstr = path + EXP
52     ndata = nlines(wchemstr) - 3 # -3 to skip the header
53     crank = ndata * [0.]
54     dwchm = ndata * [0.]
55     wchem = getydy(wchemstr, 0, 1)
56     for i in range(0, ndata):
57         crank[i] = wchem[0][i]
58         dwchm[i] = wchem[1][i]
59     return crank, dwchm
60
61 def finished(gen, design):
62     Checks if the run finished.
63     filepath = gen_ + str(int(gen)) + \
64         /design_ + str(int(design)) + /run/END
65     with open(filepath, r) as f:
66         text = f.read()
67     end = float(text)
68     return end
```

APÊNDICE D – CÓDIGO FONTE DO ALGORITMO GENÉTICO - ARQUIVO
MUGALIB.PY

```

1 from numpy import *
2 import os
3 import random
4
5 genheader = === GENERATION
6 itrheader = ----- Iteration
7
8 def readinput():
9     global title, numvar, varstr, varstrsiz, vararr, varpow
10    with open( microga.inp , r ) as f:
11        inputf = f.read()
12        eol = inputf.find( \n )
13        title = inputf[0:eol]
14        bol = eol + 9
15        eol = inputf.find( \n , bol)
16        numvar = int(inputf[bol:eol])
17        varstr    = numvar * [ ]
18        varstrsiz = numvar * [0]
19        varpow = numvar * [0]
20        vararr = numvar * [0]
21        for var in range(0, numvar):
22            bol = eol + 9
23            eol = inputf.find( \n , bol)
24            varstr[var]    = inputf[bol:eol]
25            varstrsiz[var] = len(varstr[var])
26            bol = eol + 9
27            eol = inputf.find( \n , bol)
28            numinp = int(inputf[bol:eol])
29            if (numinp != 0 and ((numinp & (numinp - 1)) == 0)):
30                varpow[var] = (numinp - 1).bit_length()
31            else:
32                raise SystemExit( %s: number of inputs is not power of 2. , varstr[var])
33            vararr[var] = numinp * [0]
34            for inp in range(0, numinp):
35                bol = eol + 1
36                eol = inputf.find( \n , bol)
37                vararr[var][inp] = float(inputf[bol:eol])
38
39    print ( \n===== )
40    print (title)
41    print ( # of optimized parameters: , numvar)
42    for var in range (0, numvar):
43        print ( \n + varstr[var][0:varstrsiz[var]] + : )
44        print ( -- , varpow[var], bit slots )
45        print (*vararr[var], sep = , )

```

```

46     print ( \nOBS: extra calculation are still not available. )
47     print ( =====\n )
48
49 def header():
50     header = bits + (sum(varpow) - 1) *
51     for var in range (0, numvar):
52         header = header + varstr[var] + (16 - varstrsiz[var]) *
53     header = header + merit value
54     return header
55
56 def start_run(gen, design, new):
57     Runs a design.
58     init = gnome-terminal -e
59     if (gen == -1):
60         path = ref_run
61     else:
62         path = gen_ + str(int(gen)) + /design_ + str(int(design))
63     command = cd + path + /run/ && mpirun -n 8 ./kiva3v
64     if (new == 0):
65         run = command
66     else:
67         run = init + " + command + "
68     error = os.system(run)
69     if (error != 0):
70         print ( Error running Kiva-3V. )
71     return error
72
73 def getinp(gen, design, inputname, stringsize):
74     Gets a value of the itape5.
75     itp5string = gen_ + str(int(gen)) + \
76     /design_ + str(int(design)) + /run/itape5
77     with open(itp5string, r ) as f:
78         text = f.read()
79     line = text.find(inputname)
80     line = line + stringsize
81     line2 = text.find( \n , line)
82     value = float(text[line:line2])
83     return value
84
85 def change(gen, design, inputname, value, stringsize):
86     Changes the value of an input
87     on itape5 to a specified one.
88     itp5string = gen_ + str(int(gen)) + \
89     /design_ + str(int(design)) + /run/itape5
90     with open(itp5string, r ) as f:
91         old = f.read()
92     line = old.find(inputname)
93     line = line + stringsize
94     line2 = old.find( \n , line)

```

```

95     valueold = float(old[line:line2])
96     lold = inputname + str(valueold)
97     lnew = inputname + str(value)
98     new = old.replace(lold, lnew)
99     with open(itp5string, w) as f:
100         f.write(new)
101
102 def copygen(gen, ref):
103     Copies a generation.
104     genname = gen_ + str(int(gen))
105     if (gen == 0):
106         os.system(mkdir + genname)
107         for i in range(0, 5):
108             os.system(mkdir + genname + /design_ + str(int(i)))
109             os.system(cp -r ref_run/run + genname + /design_ + str(int(i)) + /
110                 run )
111     else:
112         refname = gen_ + str(int(ref))
113         os.system(cp -r + refname + + genname)
114
115 def newgen(gen, ref, elite):
116     Creates a new generation based on
117     another and generates random designs,
118     maintaining unchanged only the elite design.
119     copygen (gen, ref)
120     scramble(gen, elite)
121     print ( generation elite: , elite)
122
123 def scramble(gen, elite):
124     numslots = sum(varpow)
125     for des in range(0, 5):
126         if (des != elite):
127             bitsnew = numslots * [ 0 ]
128             for slot in range(0, numslots):
129                 if (random.random() > 0.5):
130                     bitsnew[slot] = 1
131             applybits(gen, des, bitsnew)
132
133 def getydy(filename, x, y):
134     Reads a file with:
135     X      Y
136     (...) (...)
137     and stores in a array:
138     X      Y      dY/dX
139     (...) (...) (...)
140     filedata = loadtxt(filename, skiprows=2)
141     ndata = len(filedata)
142     xydy = array([ndata * [1.], ndata * [2.], ndata * [3.]])
143     xydy[0] = transpose(filedata)[x]

```

```

143     xydy[1] = transpose(filedata)[y]
144     xydy[2] = transpose(filedata)[y]
145     xydy[2][0] = 0.
146     for i in range(1, ndata):
147         xydy[2][i] = (xydy[1][i] - xydy[1][i-1])/(xydy[0][i] - xydy[0][i-1])
148     return xydy
149
150 def nlines(filename):
151     Counts the number of lines in a file.
152     with open(filename, r) as f:
153         text = f.read()
154         lineend = -1
155         l = 0
156         while (True):
157             lineini = lineend + 1
158             lineend = text.find( \n , lineini)
159             if (abs(lineend - lineini) > 80):
160                 return l
161             l += 1
162
163 def createbits(gen, design):
164     bits = sum(varpow) * [ ]
165     for var in range (0, numvar):
166         value = getinp(gen, design, varstr[var], varstrsiz[var])
167         index = vararr[var].index(value)
168         strformat = {0:0 + str(int(varpow[var])) + b}
169         for slot in range(0, varpow[var]):
170             bits[int(sum(varpow[0:var]))+slot] = strformat.format(index)[slot]
171     return bits
172
173 def bit2str(bits):
174     bitstring =
175     for slot in range (0, sum(varpow)):
176         bitstring = bitstring + bits[slot]
177     return bitstring
178
179 def createchild(par1, par2):
180     numslots = sum(varpow)
181     bitout = list(par1)
182     for slot in range(0, numslots):
183         if (random.random() > 0.5):
184             bitout[slot] = par2[slot]
185     return bitout
186
187 def applybits(gen, design, bitref):
188     arrayvars = bits2floats(bitref)
189     for var in range (0, numvar):
190         change(gen, design, varstr[var], arrayvars[var], varstrsiz[var])
191

```

```

192 def bits2floats(bitref):
193     bitstring = bit2str(bitref)
194     arrayout = numvar * [0.]
195     for var in range (0, numvar):
196         ini = int(sum(varpow[0:var]))
197         end = sum(varpow[0:var+1])
198         bitvar = bitstring[ini:end]
199         arrayout[var] = vararr[var][int(bitvar, 2)]
200     return arrayout
201
202 def printdesign(bits, merit, outf):
203     bitstring = bit2str(bits)
204     arrayvars = bits2floats(bits)
205     numslots = sum(varpow)
206     line = bitstring +
207     for var in range (0, numvar):
208         line = line + {0:+04e} .format(arrayvars[var]) +
209     line = line + {0:+04e} .format(merit)
210     print (line)
211     outf.write(line + \n )
212     outf.flush()
213     os.fsync(outf.fileno())
214
215 def writebank(bits, merit):
216     bitstring = bit2str(bits)
217     arrayvars = bits2floats(bits)
218     filestring = bitsbank/ + bitstring
219     with open(filestring, w ) as f:
220         f.write (bitstring + \n )
221         f.write (str(merit) + \n )
222         for var in range(0, numvar):
223             f.write (varstr[var] +          + str(arrayvars[var]) + \n )
224
225 def readbank(bits):
226     bitstring = bit2str(bits)
227     arrayvars = numvar * [0.]
228     filestring = bitsbank/ + bitstring
229     with open(filestring, r ) as f:
230         bankf = f.read()
231         eol = bankf.find( \n )
232         bread = bankf[0:eol]
233         if (bread != bitstring):
234             print ( Error when reading from bank. )
235         bol = eol + 1
236         eol = bankf.find( \n , bol)
237         merit = float(bankf[bol:eol])
238         return merit

```