

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA E PRODUÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

DANILO SOUSA ROCHA

ANÁLISE NUMÉRICA DO DESEMPENHO DE UM MOTOR DIESEL
TURBOALIMENTADO OPERANDO COM MISTURA ÓLEO DIESEL-BIODIESEL DE
MAMONA

FORTALEZA

2011

DANILO SOUSA ROCHA

ANÁLISE NUMÉRICA DO DESEMPENHO DE UM MOTOR DIESEL
TURBOALIMENTADO OPERANDO COM MISTURA ÓLEO DIESEL-BIODIESEL DE
MAMONA

Dissertação submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica.

Área de concentração: Processos, Equipamentos e Sistemas para Energias Renováveis.

Orientador: Prof. Dr. André Valente Bueno

Co-orientador: Prof. Dr. José Antônio Velásquez

FORTALEZA

2011

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca de Pós Graduação em Engenharia

R572a Rocha, Danilo Sousa.
Análise numérica do desempenho de um motor diesel turboalimentado operando com
mistura óleo diesel – biodiesel de mamona / Danilo Sousa Rocha. – 2011.
84 f. : il. color., enc. ; 30 cm.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia,
Departamento de Engenharia Mecânica e Produção, Programa de Pós – Graduação em
Engenharia Mecânica, Fortaleza, 2011.

Área de Concentração: Processos, equipamentos e sistemas para energias renováveis.

Orientação: Prof. Dr. André Valente Bueno.

Coorientação: José Antônio Velásquez

1. Engenharia Mecânica. 2. Energia – fontes alternativas. 3. Biocombustíveis. 4. Motores de
combustão interna. I. Título.

CDD 620.1

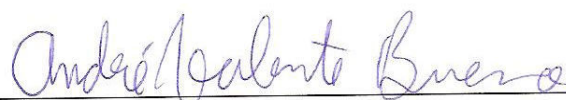
DANILO SOUSA ROCHA

ANÁLISE NUMÉRICA DO DESEMPENHO DE UM MOTOR DIESEL
TURBOALIMENTADO OPERANDO COM MISTURA
ÓLEO DIESEL-BIODIESEL DE MAMONA

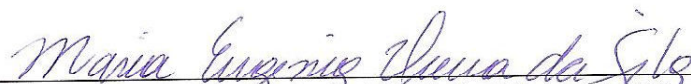
Dissertação submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica, Área de Concentração em Processos, Equipamentos e Sistemas para Energias Renováveis.

Aprovada em 20 / 05 / 2011

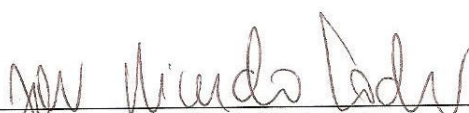
BANCA EXAMINADORA



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



Prof.^a Dra. Maria Eugênia Vieira da Silva
Universidade Federal do Ceará



Prof. Dr. José Ricardo Sodré
Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais

Aos meus pais, por todo o esforço
empregado para que um dia eu
pudesse chegar aqui.

AGRADECIMENTOS

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro a este trabalho sob os projetos de número 479450/2007-2 e 552809/2007-1.

Ao Prof. Dr. André Valente Bueno pela paciência e dedicação na orientação desta pesquisa.

Ao Prof. Dr. José Antônio Velásquez pela concessão de dados experimentais obtidos em laboratório na Pontifícia Universidade Católica do Paraná (PUC – PR).

Aos companheiros de mestrado Anderson e Samuel pelos momentos de reflexão e distração durante todo este período.

A todos os professores e funcionários que compõem o Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Ceará (PPGEM – UFC) que, de forma direta ou indireta, contribuíram para a conclusão deste trabalho.

A todas as pessoas sem ligação com este programa de mestrado que foram igualmente importantes na minha vida durante este período.

RESUMO

Os efeitos da adição do biodiesel proveniente do óleo de mamona ao óleo diesel convencional foram estudados empregando-se ensaios dinamométricos e simulações multidimensionais. Avaliou-se o impacto desta adição na dinâmica do jato de combustível e na formação de óxidos de nitrogênio. Empregaram-se o código multidimensional KIVA 3 VR2 para a realização das simulações computacionais e curvas experimentais de pressão no cilindro de um motor diesel rápido turboalimentado na validação destas simulações. Os combustíveis analisados foram o óleo diesel mineral e a mistura B20, composta por 80% de óleo diesel e 20% de éster metílico do óleo de mamona, em volume. Os resultados obtidos indicam que a adição de biodiesel provoca um acréscimo na penetração do jato de combustível devido as suas características inferiores de atomização com relação ao óleo diesel. As emissões de óxidos de nitrogênio foram consideravelmente superiores com o emprego da mistura B20, por conta de um aumento na parcela do jato de combustível exposta a altas temperaturas e condições de queima pobre comparadas a estequiométrica.

Palavras-chave: Energias Renováveis, Motores de Combustão Interna, Biodiesel.

ABSTRACT

The effects of the addition of biodiesel to mineral diesel oil were studied employing dynamometer tests and multidimensional simulations. The impact of this addition upon the dynamics of the fuel jet and upon the formation of nitrogen oxides was accessed employing the multidimensional code KIVA 3 VR2 to carry out the computational simulations, which were validated against experimental curves of in cylinder pressure. The utilized fuels were diesel oil and B20 blend, comprising of 80% diesel oil and 20% methyl ester of castor oil, by volume. The results indicate that the addition of biodiesel causes an increase in the penetration of the fuel jet due to its lower atomization characteristics compared to diesel oil. Emissions of nitrogen oxides were higher with the use of B20 blends, due to an increase in the share of fuel jet exposed to high temperatures and lean burning conditions compared to stoichiometric.

Keywords: Renewable Energy, Internal Combustion Engine, Biodiesel.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1. Regimes de <i>spray</i> de fluxo bifásico [17].....	21
Figura 2.2. Estrutura computacional do código KIVA (adaptado a partir de [25]).....	34
Figura 2.3. Balanço de energia no cilindro do motor	35
Figura 3.1. Estrutura molecular do ácido graxo ricinoléico (composto predominante no biodiesel de mamona)	41
Figura 3.2. Dados tabulados de condutividade térmica em função da temperatura	45
Figura 3.3. Pressão de vapor em função da temperatura	46
Figura 3.4. Calor latente de vaporização em função da temperatura	47
Figura 3.5. Tensão superficial em função da temperatura.....	48
Figura 3.6. Viscosidade em função da temperatura.....	50
Figura 5.1 Malha computacional da câmara de combustão do pistão	62
Figura 5.2. Avaliação da dependência dos resultados quanto à malha computacional através da emissão de (a) óxido de nitrogênio e (b) monóxido de carbono.....	63
Figura 5.3. Curvas de pressão no cilindro (numéricas e experimentais).....	65
Figura 5.4. Curvas de liberação de energia (numéricas e experimentais)	66
Figura 5.5. Parcelas de combustível (temperaturas apresentadas na escala Kelvin).....	68
Figura 5.6. Contornos do jato de combustível no PMS (temperaturas apresentadas na escala Kelvin)	69
Figura 5.7. Contornos do jato de combustível a 8,5° do PMS (temperaturas apresentadas na escala Kelvin)	72
Figura 5.8. Contornos do jato de combustível a 8,5° do PMS (ppm NO).....	73
Figura 5.9. Contornos do trecho do jato de combustível com relação de equivalência combustível/ar superior a 2, com o pistão a 8,5° do PMS.....	74

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1. Especificações do motor	39
Tabela 3.2. Precisão nas medições	39
Tabela 3.3. Propriedades dos combustíveis considerados nas simulações.....	39
Tabela 3.4. Propriedades críticas e ponto de ebulição do biodiesel de mamona.....	43
Tabela 3.5. Comparação das propriedades obtidas através de outros métodos.....	44
Tabela 3.6. Coeficientes de Antoine.....	46
Tabela 3.7. Propriedades críticas e temperatura normal de ebulição do n-dodecano.....	51
Tabela 4.1. Mecanismo de reações para auto-ignição (modelo Shell)	56

LISTA DE SÍMBOLOS

A, A^*, B^*, Q^*, Y^*	Parâmetros auxiliares das equações
a	Aceleração
af	Relação ar-combustível
B	Agente de ramificação
BXX	Mistura entre diesel e biodiesel contendo XX% de biodiesel (em volume)
c_D	Coefficiente de arrasto
c_p	Calor específico à pressão constante
c_v	Calor específico à volume constante
D	Difusividade do vapor de combustível no ar
d	Diâmetro
f	Número provável de gotas por unidade de volume, Eq. (3.1)
F^s	Taxa de ganho de momento
h	Entalpia específica
k	Energia cinética turbulenta
	Número possível de colisões entre gotas
L	Calor latente de vaporização
l	Comprimento
MM	Massa molar
\dot{m}_f	Fluxo de massa de combustível
Oh	Número de Ohnesorge
P	Pressão
	Produtos das reações de combustão
P_v	Pressão de vapor
$P(k)$	Distribuição de Poisson
Q	Espécies intermediárias
\dot{Q}	Taxa de transferência de calor
R	Constante universal dos gases
	Taxa de variação temporal do raio da gota
r	Raio da gota
Re	Número de Reynolds
RH	Radical hidrocarboneto

R^*	Radicais formados a partir do combustível
Sc	Número de Schmidt
Sh	Número de Sherwood
T	Temperatura absoluta
T_r	Temperatura reduzida
t	Tempo
U	Energia interna
u	Energia interna específica
u_{rel}	Velocidade relativa
V	Volume
\vec{v}	Velocidade da gota
\dot{W}	Potência
We	Número de Weber
\dot{w}	Taxa de consumo de reagentes
Y	Fração mássica de uma espécie química
y	Parâmetro de distorção da gota

Gregos

$\alpha, \beta, \gamma, \Phi$	Parâmetros auxiliares das equações
γ	Razão entre os calores específicos c_p/c_v
ΔH_v	Entalpia de vaporização
Δt	Incremento de tempo computacional
τ	Escala de tempo turbulenta
$\vec{\tau}$	Tensor de tensões viscosas
η	Espectro senoidal dos deslocamentos na superfície do jato
θ	Ângulo de manivela
	Fração de volume ocupado pela fase gasosa
λ	Condutividade Térmica
Λ	Comprimento de onda da perturbação na superfície do jato
ν_{12}	Frequência de colisão entre gotas
ρ	Densidade

σ	Tensão superficial
ε	Taxa de dissipação turbulenta
ν	Viscosidade
ϕ	Relação de equivalência combustível-ar
ω	Taxa de crescimento da perturbação na superfície do jato
Ω	Maior taxa de crescimento da perturbação no jato

Subscritos

a	Referente ao ar
ant	Referente aos coeficientes de Antoine
b	Referente ao ponto normal de ebulição
bu	Referente à quebra do jato (breakup)
c	Referente às propriedades críticas
$coll$	Referente à colisão entre gotas
$comb$	Referente ao combustível
cq	Referente à cinética química
d	Referente à gota
ebu	Referente ao modelo de combustão eddy-breakup
f	Referente ao combustível
g	Referente ao estado gasoso
KH	Referente ao modelo Kelvin-Helmholtz de quebra de jato
l	Referente ao estado líquido
P	Referente aos produtos das reações químicas
st	Referente às relações estequiométricas
noz	Referente ao orifício do bico injetor
RT	Referente ao modelo Rayleigh-Taylor de quebra de jato

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	14
1.1	Impacto operacional da adição de biodiesel ao óleo diesel	14
1.2	O biodiesel de mamona e as técnicas de análise e validação utilizadas	16
1.3	Estrutura da dissertação	17
2	SIMULAÇÃO E ANÁLISE DE MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA.....	19
2.1	Modelos multidimensionais para a simulação de motores de combustão interna	19
2.1.1	Método de descrição Lagrangeana do movimento das gotículas de combustível	20
2.1.2	Modelo de colisão das gotas	23
2.1.3	Vaporização de gotas de combustível.....	24
2.1.4	Método de descrição Euleriana do movimento da fase gasosa.....	26
2.1.5	Estrutura do código computacional	32
2.2	Análise de liberação de energia	35
3	DADOS EXPERIMENTAIS E PROPRIEDADES DOS COMBUSTÍVEIS.....	38
3.1	Aparato experimental aplicado nos ensaios dinamométricos	38
3.2	Propriedades do biodiesel de mamona	40
3.2.1	A estrutura considerada para a cadeia do biodiesel	40
3.2.2	Propriedades críticas	41
3.2.3	Condutividade térmica.....	44
3.2.4	Pressão de vapor	45
3.2.5	Calor latente de vaporização.....	46
3.2.6	Tensão superficial	48
3.2.7	Viscosidade.....	49
3.3	Propriedades da mistura B20	50
4	MODELOS NUMÉRICOS IMPLEMENTADOS.....	52
4.1	Modelo de formação de jato de combustível.....	52
4.2	Modelos de ignição	56
4.3	Modelos de combustão	58
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	61
5.1	Avaliação de consumo/desempenho.....	61

5.2	Geração da malha computacional e condições iniciais de simulação.....	61
5.3	Resultados das simulações – influência da mistura B20 na formação do jato	64
5.4	Avaliação da emissão de poluentes	70
6	CONCLUSÕES.....	75
	REFERÊNCIAS	76

1 INTRODUÇÃO

A utilização de fontes renováveis de energia é uma boa estratégia para coibir o uso dos combustíveis fósseis empregados na geração de potência e nos meios de transporte. Neste contexto, o biodiesel tem se mostrado um combustível alternativo promissor, principalmente pelo fato de produzir menores índices de emissão de poluentes, e por ser produzido a partir de matéria-prima renovável (girassol, mamona, soja, etc.), abundante no território nacional. Programas governamentais têm incentivado a utilização de diferentes tipos de biomassa, de acordo com as disponibilidades de cada região. Com relação ao biodiesel, metas são estabelecidas para sua implementação gradativa ao óleo combustível, seguindo um plano de aumento do percentual de concentração até valores expressivos. Deste modo, as modificações nas condições operacionais de motores de combustão interna provenientes da adição de biodiesel ao óleo diesel convencional devem ser avaliadas em detalhe.

1.1 Impacto operacional da adição de biodiesel ao óleo diesel

A maior parte dos trabalhos que abordaram o desempenho operacional do biodiesel empregou ésteres metílicos do óleo de soja ou girassol. Os resultados obtidos com a adição destes tipos de biodiesel no óleo diesel comum destacam a importância das modificações introduzidas nas propriedades do combustível. Para o biodiesel proveniente de óleo de soja, a combinação entre a redução da relação C/H do combustível, a introdução de oxigênio em sua composição e o aumento de sua viscosidade fazem com que a adição de biodiesel ao óleo diesel mineral provoque um empobrecimento na combustão. Essas modificações no processo de combustão costumam ter os seguintes efeitos na distribuição dada à exergia do combustível no interior do cilindro [1]:

- aumento da irreversibilidade devido à redução da temperatura dos gases do cilindro;
- redução das frações da exergia do combustível rejeitadas sob a forma de calor e de exergia de gases de escape.

Com a adição de biodiesel em frações inferiores a 20% em volume, a combinação desses efeitos costuma aumentar a parcela da exergia do combustível transferida como trabalho indicado e, portanto, a eficiência térmica do motor. Desse modo, têm sido reportados dados onde a eficiência térmica do motor é elevada com a adição de biodiesel em baixas concentrações [1 – 3] ou se mantém praticamente inalterada [4].

O consumo específico do motor é dado pelo inverso do produto entre o poder calorífico do combustível e a eficiência térmica do motor, estabelecendo-se para o seu comportamento um compromisso entre o aumento da eficiência térmica e a redução do poder calorífico do combustível com a adição de biodiesel. O melhor compromisso entre esses fatores tem sido alcançado com a adoção das misturas B10 [1] e B20 [2], com as quais se obtiveram reduções médias da ordem de 2% no consumo específico de combustível com relação ao óleo diesel.

O uso do biodiesel também modifica os níveis de emissão dos principais poluentes relacionados aos motores diesel: os óxidos de nitrogênio e o material particulado. Segundo Chang *et al.* [5], um combustível mais viscoso como o biodiesel aumenta a velocidade do jato e sua distância de penetração. Desta forma, a adição de biodiesel amplifica a parcela da mistura exposta a altas temperaturas na periferia deste jato durante a combustão difusiva, levando a um leve favorecimento à formação de óxidos de nitrogênio com a operação do motor em cargas elevadas [6]. Para condições de baixa carga, a combustão pré-misturada passa a ter uma participação importante no desenvolvimento de altas temperaturas no jato de combustível, fazendo com que a menor temperatura de chama das misturas contendo biodiesel provoque uma redução nas emissões de óxidos de nitrogênio [7]. A extensão dessas tendências é dependente da tecnologia de formação de mistura aplicada em cada motor, que governa a distribuição entre os mecanismos de queima pré-misturada e difusiva em cada regime de operação. A influência da configuração do motor sobre a formação deste poluente foi evidenciada pela Agência de Proteção Ambiental Estadunidense, que efetuou um estudo detalhado dos efeitos da utilização do biodiesel sobre as emissões de exaustão. Para a aplicação da mistura B20, por exemplo, registram-se alterações de -6% a +8% na emissão de óxidos de nitrogênio de acordo com o modelo de motor utilizado [8].

Em relação ao material particulado, a utilização do biodiesel pode contribuir para o abatimento da emissão desses poluentes nos grandes centros urbanos. Por apresentar oxigênio em sua composição, o biodiesel introduz um oxidante nas regiões de mistura rica do

jato de combustível, fornecendo um caminho alternativo para os precursores da fuligem. Obtém-se, deste modo, uma redução na fração não-solúvel do material particulado que possui forte correlação com a concentração de oxigênio presente no combustível [9]. A restrição obtida na emissão de material particulado também depende da configuração do motor empregado, tendo sido observadas reduções médias de 10,1% a 25% mediante a utilização da mistura B20 [8, 9].

1.2 O biodiesel de mamona e as técnicas de análise e validação utilizadas

No início da implantação do programa nacional de biodiesel, houve uma grande expectativa quanto à obtenção deste combustível a partir do óleo de mamona; uma cultura compatível com os sistemas de produção adotados nos programas de agricultura familiar e totalmente adaptada à região do semi-árido nordestino. Sob o ponto de vista da análise dos motores de combustão interna, há ainda outra vantagem quanto ao estudo do biodiesel de mamona: devido às suas características físico-químicas singulares, como uma viscosidade quase seis vezes superior à do óleo diesel mineral, espera-se que sua adição ao óleo diesel mineral cause modificações mais radicais e, portanto, mais nítidas que os demais tipos de biodiesel no desenvolvimento do jato de combustível.

Apesar destes atrativos, há ainda uma clara lacuna na literatura quanto à disponibilidade de dados a respeito dos efeitos da utilização do biodiesel proveniente da mamona nos processos internos do cilindro. Tais processos (formação do jato de combustível, condições térmicas para formação de poluentes, entre outros), importantes para determinação de parâmetros operacionais do motor, são extremamente difíceis de serem analisados, principalmente pela dificuldade de visualização do interior do cilindro durante os cursos do pistão. Uma alternativa às técnicas fenomenológicas são as simulações multidimensionais realizadas em softwares apropriados. Quando validadas a partir de dados experimentais em condições reais de operação, estas simulações podem resultar num diagnóstico confiável do que ocorre na câmara de combustão. Este tema é abordado detalhadamente no presente trabalho.

Os efeitos da adição do éster metílico do óleo de mamona (biodiesel) ao óleo diesel convencional no desempenho operacional de um motor diesel turboalimentado foram avaliados empregando-se o código KIVA 3 VR2 [10-12]. Utilizaram-se dados experimentais de pressão no cilindro obtidos em ensaios dinamométricos para validar as simulações multidimensionais, de acordo com os procedimentos sugeridos por Reitz e Rutland [13]. Tanto nos ensaios experimentais, como nas simulações, a mistura combustível analisada foi a B20 (20% de éster metílico do óleo de mamona em volume no óleo diesel), a qual vem apresentando bons resultados em testes realizados com biodiesel advindo de diversas matérias-primas. Obtiveram-se soluções numéricas para o escoamento tridimensional presente no cilindro do motor utilizando-se uma geometria detalhada do pistão, tendo-se incluído na análise os efeitos da turbulência, da transferência de calor pelas fronteiras do sistema, das quebras primária e secundária do *spray* de gotículas de combustível, da cinética química de pré-ignição e das reações de combustão difusiva. Além disso, também foi necessário o levantamento das propriedades termofísicas do biodiesel de mamona empregadas nas simulações.

1.3 Estrutura da dissertação

A dissertação é dividida em 6 capítulos a saber: Introdução, Simulação e Análise de Motores de Combustão Interna, Dados Experimentais e Propriedades dos Combustíveis, Modelos Numéricos Implementados, Resultados e Discussões e, por último, as Conclusões.

O Capítulo 2 traz um resumo dos modelos computacionais aplicados em simulações numéricas na área de motores de combustão interna, tendo-se dado ênfase aos modelos utilizados pelo código KIVA. Também se aborda, neste capítulo, a ferramenta de análise de liberação de energia (*Heat Release Analysis*).

Descreve-se, no Capítulo 3, o motor e os combustíveis utilizados para o desenvolvimento das simulações. Ainda neste capítulo abordaram-se métodos adotados para o cálculo das propriedades termofísicas do biodiesel de mamona e da mistura B20. Foram priorizadas propriedades necessárias à simulação do jato de combustível: propriedades

críticas, condutividade térmica, pressão de vapor, entalpia de vaporização, tensão superficial e viscosidade.

As simulações iniciais foram realizadas empregando-se os modelos originais do código KIVA para formação e quebra do jato de combustível, cinética química de ignição e combustão. Os resultados obtidos a partir destes modelos não se mostraram satisfatórios para validação das simulações devido a uma redução na taxa de liberação de energia a partir de 20° de ângulo de manivela após o ponto morto superior. Para contornar essa dificuldade implementaram-se no software KIVA modelos baseados na literatura (quebra de jato de combustível e cinética química de ignição) e um novo modelo para o processo de combustão turbulenta difusiva. Estas modificações no código computacional são apresentadas no Capítulo 4.

Nos capítulos 5 e 6 são apresentados os resultados e conclusões observados para os efeitos da adição do biodiesel proveniente da mamona ao óleo diesel, tendo-se priorizado modificações nos parâmetros de operação do motor, nas condições de queima e nas emissões de óxidos de nitrogênio.

2 SIMULAÇÃO E ANÁLISE DE MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA

Dois métodos de análise costumam ser utilizados para se ter acesso aos fenômenos ocorrentes na câmara de combustão: imagens do interior do cilindro obtidas através de câmeras de alta velocidade e/ou resultados numéricos obtidos com softwares que utilizam a técnica CFD (*Computational Fluid Dynamics*). Os métodos óticos necessários à captura de imagens e iluminação da câmara de combustão requerem um motor e condições operacionais muito específicas, além de equipamentos com alto custo de aquisição. Concentrações de substâncias químicas como a hidroxila e alguns precursores da fuligem têm sido mapeadas qualitativamente através de técnicas de laser planar, levantando-se um panorama preciso dos processos de combustão e da formação de substâncias poluentes no cilindro [14, 15]. Avaliações semelhantes também podem ser alcançadas, a um custo bem inferior, através de simulações multidimensionais como as conduzidas neste trabalho. Contudo, as simulações computacionais incorporam incertezas de modelagem e erro numérico, devendo ser validadas a partir de dados experimentais para que se possa garantir um nível aceitável de precisão e confiabilidade em seus resultados. Depois de validadas, tais simulações são ferramentas úteis para a otimização de sistemas térmicos, principalmente quando a medição direta de determinados parâmetros é difícil ou inviável.

2.1 Modelos multidimensionais para a simulação de motores de combustão interna

A utilização de métodos computacionais para reproduzir fenômenos reais vem sendo difundida em diversas áreas da engenharia devido, em parte, ao aumento massivo da potência dos processadores e da memória disponível para simulações. Soluções detalhadas que demandariam uma carga computacional de semanas, ou até mesmo meses, na década de 1990 podem ser obtidas em poucas horas com este avanço. Na área de motores de combustão interna, costumam-se aplicar modelos multidimensionais para se avaliar a influência de processos como a distribuição e vaporização das gotículas de combustível, a ignição e a formação do jato de combustível sobre o desempenho do motor e até mesmo sobre as taxas de

emissão de poluentes. O código multidimensional KIVA III VR-2 utilizado aqui com este propósito vem sendo amplamente aplicado em pesquisas na academia e na indústria.

No curso do presente trabalho, alguns dos modelos que constituíam o código KIVA padrão não se mostraram satisfatórios já nas etapas iniciais de validação, tendo sido necessária a implementação de submodelos retirados da literatura (quebra de jato de combustível e cinética química de ignição) e de um novo modelo para o processo de combustão turbulenta difusiva. Na seqüência do presente capítulo, é apresentada uma breve descrição do código KIVA original, incluindo-se apenas os submodelos que não sofreram modificações. Os submodelos alterados são apresentados no Capítulo 4.

2.1.1 Método de descrição Lagrangeana do movimento das gotículas de combustível

A ignição do combustível, as taxas de liberação de energia e formação de poluentes, dentre outros parâmetros do motor, são fortemente influenciados pela evaporação do combustível líquido na câmara de combustão. A evaporação, por sua vez, depende do regime de pulverização do jato de combustível na fase gasosa contida no cilindro do motor.

Num *spray* de fluxo bifásico, o combustível sai do bico injetor na fase líquida onde pode ser identificada uma região densa chamada de “núcleo intacto”. Este núcleo rapidamente se desintegra e forma as gotículas que compõem a região chamada de *spray* “grosso” ou denso. Este regime ocorre nas proximidades do bico injetor, onde a fração de volume ocupado pela fase líquida é grande em relação à fração ocupada pela fase gasosa em cada célula da grade computacional.

Devido à forma cônica que o *spray* toma e à vaporização do combustível, o espaçamento entre as gotículas aumenta, deixando “espaços vazios” que são ocupados pelo combustível na fase gasosa e pelo ar do cilindro. Essa região intermediária, onde podem ser notadas claramente as duas fases do combustível, é chamada de *spray* “fino”. Neste regime a fração de massa líquida ainda é significativa e, portanto, há transferência de momento considerável das gotículas para a fase gasosa.

À medida que a fração de volume ocupada pela fase gasosa se aproxima da unidade, a fração de massa na fase líquida passa a ser insignificante, e esse regime é chamado

de *spray* “muito fino” ou diluído. Nesse regime, devido ao grande espaçamento, o comportamento das gotículas pode ser aproximado com base no cálculo de uma gotícula isolada com precisão, apesar de ainda haver transferência de massa, momento e energia da gota para a fase gasosa. Apesar das diferenças de comportamento das gotículas em cada regime, a transição entre eles é contínua e definida de forma arbitrária em termos da fração de volume ocupado pela fase gasosa (θ):

$$\theta = 1 - \iiint f \frac{4}{3} \pi r^3 dr d\vec{v} dT_d \quad (2.1)$$

na qual f representa o número provável de gotas por unidade de volume no *spray* (função densidade de probabilidade). Para exemplificar, considera-se um arranjo regular de gotas esféricas com espaçamento entre elas igual ao seu diâmetro. A fração de vazio do *spray* é de aproximadamente 0,92 no regime diluído [16]. Assim, é assumido que o jato deve ser caracterizado no regime de *spray* grosso quando a fração de espaço vazio for menor que 0,9.

A Figura 2.1 traz um desenho esquemático dos regimes de *spray*: núcleo intacto (intact), grosso (thick), fino e (thin) e muito fino (very thin). O regime denominado de fluxo de agitação (churning flow) na Figura 2.1 é um regime “extra” definido por O’Rourke [16] e adotado por um pequeno número de pesquisadores da área. Este regime pode ser definido quando a fração de volume da fase líquida é igual ou superior à da fase gasosa, que neste momento é descontínua.

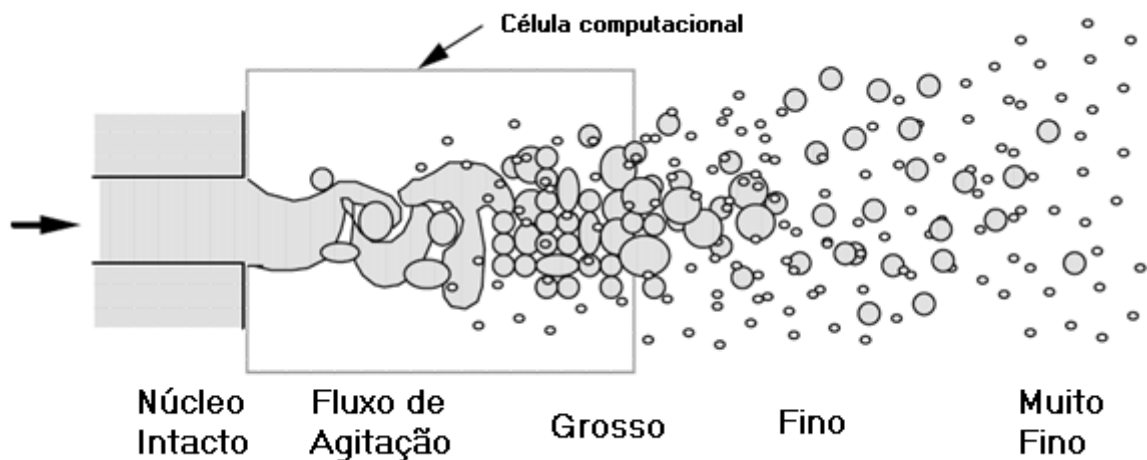


Figura 2.1. Regimes de *spray* de fluxo bifásico [17]

A maioria dos códigos CFD disponíveis trabalha apenas com as hipóteses de *spray* fino e diluído ($\theta > 0,9$). Isto se justifica, em tese, pela grande diferença entre as dimensões da célula computacional e do orifício do bico injetor. Em aplicações típicas de motores de combustão, as células tem dimensões da ordem de 1 mm, enquanto os atuais injetores diesel têm orifícios de diâmetro da ordem de 0,1 mm.

No *spray* diesel o combustível líquido é pulverizado em mais de 10^8 gotículas com diâmetros médios de 10 μm . Com esses números, fica impossível resolver a Equação 2.1 para cada gota em simulações numéricas, sendo utilizada nesta descrição uma média estatística e submodelos específicos para cada um dos processos sofridos pelos grupos de gota (parcelas). De uma forma genérica, o problema pode ser resumido com a solução da equação do *spray* (Eq. 2.2), tal como formulada por Williams [18]. Nela, o número provável de gotas por unidade de volume no tempo t , que estão localizados entre x e $x + dx$ e caracterizada por uma velocidade entre v e $v + dv$, um raio entre r e $r + dr$ e uma temperatura entre T_d e $T_d + dT_d$ é descrita pela função f . Como a posição x da gota e sua velocidade v têm três coordenadas espaciais, f tem um total de 9 variáveis independentes: $x(3)$, $v(3)$, r , T_d , t . Essa solução baseia-se nas hipóteses de que a gota é idealmente esférica e que a velocidade relativa entre ela e o gás é pequena, o que não acontece em *spray* de motores a combustão. De fato, essas velocidades são tão consideráveis a ponto de causar distorção e a quebra das gotas. No KIVA adicionam-se duas variáveis independentes na função f : o parâmetro de distorção da gotícula y e sua taxa temporal \dot{y} . Deste modo, a chamada equação do *spray* que é dada pela evolução temporal e espacial da função densidade de probabilidade f passa a ser descrita pela Equação 2.2:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial x}(f\vec{v}) - \frac{\partial}{\partial v}(f\vec{a}) - \frac{\partial}{\partial r}(fR) - \frac{\partial}{\partial T_d}(f\dot{T}_d) - \frac{\partial}{\partial y}(f\dot{y}) - \\ & \frac{\partial}{\partial \dot{y}}(f\ddot{y}) + f_{col} + f_{bu} \end{aligned} \quad (2.2)$$

na qual $\vec{a} = d\vec{v}/dt$ é uma aceleração, R , \dot{T}_d e \dot{y} são taxas temporais do raio, da temperatura e da velocidade de oscilação, respectivamente. O termo f_{bu} está relacionado com o

desmembramento das gotas (breakup) e f_{col} refere-se às alterações provindas da colisão entre elas.

Há dois caminhos possíveis para solucionar a equação do *spray* levando em conta a conservação da massa, momento e energia do sistema. O mais direto é resolver diretamente a equação pelo método de diferenças finitas, chamado de modelo de gota contínua – CDM [19, 20]. Entretanto este método requer uma discretização da função em todas as 11 variáveis independentes da equação do *spray*, o que demanda muita memória computacional, tornando este método impraticável. O modelo de gotícula discreta (DDM) é caracterizado por um menor esforço computacional, tendo sido utilizado no software KIVA. Neste modelo, diversas gotículas do *spray* são agrupadas em 10^3 a 10^4 partículas aleatórias referidas por parcelas, adotando-se uma formulação Lagrangeana na descrição do movimento de cada parcela [21]. As parcelas podem ser vistas como uma classe representativa de gotículas idênticas, as quais não interagem entre si. O maior inconveniente do DDM é causar uma forte dependência quanto à grade numérica em submodelos como o de colisão de gotículas.

2.1.2 Modelo de colisão das gotas

Quando duas ou mais gotas colidem em um jato de combustível diesel pode ocorrer a adesão permanente, adesão seguida de quebra, ou um colapso das gotas [16]. Portanto, o fenômeno de colisão altera o diâmetro das gotículas no jato, sua penetração e a distribuição de combustível na câmara de combustão. O número de gotículas injetadas no cilindro a cada ciclo inviabiliza o tratamento individualizado de colisões, o que leva à aplicação de técnicas estatísticas para a previsão de colisão entre as gotas de duas parcelas diferentes. Nessas técnicas, a probabilidade de colisão depende das velocidades das parcelas e da fração de espaço vazio dentro do volume de controle considerado.

A colisão entre gotículas do *spray* é considerada no código KIVA através do modelo proposto por O'Rourke e Bracco [16, 22]. Neste modelo, a fase gasosa de cada célula da malha computacional é definida como o volume de controle ($V_{controle}$) para fins de cálculos de colisão, a qual poderá ocorrer se duas ou mais parcelas ocuparem a mesma célula. Seguindo uma formulação similar a da teoria de cinética dos gases, a frequência de colisão ν_{12}

pode ser definida entre N_1 gotas da parcela 1 (que contém as maiores gotas) e N_2 gotas da parcela 2 (gotas menores):

$$v_{12} = \frac{N_2}{V_{controle}} \pi(r_1 + r_2)^2 \cdot |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \quad (2.3)$$

O número provável de colisões k segue uma distribuição de Poisson:

$$P(k) = \frac{(v_{12} \cdot \Delta t)^k}{k!} \exp(-v_{12} \cdot \Delta t) \quad (2.4)$$

com Δt sendo o incremento de tempo computacional.

Como a previsão do número de colisões a partir destas equações é função do volume da célula computacional ocupada pelas parcelas, existe uma grande dependência desses resultados quanto à grade computacional adotada. Além disto, ainda não foram reportadas técnicas experimentais satisfatórias para a obtenção de dados para o diâmetro das gotículas e para a fração de espaço vazio nas regiões próximas ao bico injetor, onde as colisões predominam. Estes fatores dificultam a calibração adequada do modelo de colisão e, em algumas simulações conduzidas no presente trabalho, o uso do modelo de colisão levou a resultados insatisfatórios para a dinâmica do jato de combustível. A solução adotada aqui para este problema foi desabilitar o modelo de colisão e coalescência, tendo-se considerado indiretamente os efeitos de colisão entre gotas ao se validar a rotina de quebra do jato com as curvas de liberação de energia.

2.1.3 Vaporização de gotas de combustível

A vaporização das gotículas de combustível é governada pela transferência de calor e pelo transporte de vapor de combustível nos gases do cilindro. A transferência de calor se dá pelos modos de condução, convecção e radiação, enquanto o transporte de massa ocorre por convecção e difusão. Tem-se, portanto, um problema conjugado de transferência

de calor e massa. Esse problema é resolvido no código KIVA através da correlação Frossling [23], que determina a taxa de variação do raio da gota (R):

$$R = \frac{dr}{dt} = - \frac{\rho_a D B^* Sh}{2\rho_1 r} \quad (2.5)$$

na qual D é a difusividade, em base mássica, dos vapores de combustível no ar. O parâmetro B^* é chamado de número de transferência de massa, $B^* = (Y_1^* - Y_1)/(1 - Y_1^*)$, onde Y_1^* é a fração de massa de combustível na superfície da gota e Y_1 é a fração de massa de combustível na célula computacional (ρ_1/ρ). O termo Sh é o número adimensional de Sherwood pode ser expresso pela correlação:

$$Sh = (2 + 0,6 Re_d^{1/2} Sc^{1/3}) \frac{\ln(1 + B^*)}{B^*} \quad (2.6)$$

na qual Re e Sc são respectivamente os números adimensionais de Reynolds e Schmidt. A fração de massa de combustível na superfície da gota (Y_1^*) é obtida considerando a pressão parcial do vapor de combustível igual a pressão de vapor de equilíbrio p_v , na temperatura da gota:

$$Y_1^* = W_1 / \left[W_1 + W_0 \left(\frac{p}{p_v(T_d)} - 1 \right) \right] \quad (2.7)$$

na qual W_1 e W_0 são, respectivamente, a massa molecular do combustível e do ar, e p é a pressão do ar.

A variação de temperatura da gota (dT_d/dt) é calculada a partir de um balanço de energia envolvendo o calor latente de vaporização e a condução de calor a partir do gás quente:

$$\rho_d \frac{4}{3} \pi r^3 c_i \frac{dT_d}{dt} - \rho_d 4\pi r^2 RL = 4\pi r^2 \dot{Q}_d \quad (2.8)$$

na qual c_l é o calor específico da fase líquida, L é o calor latente de vaporização e \dot{Q}_d é a taxa de transferência de calor por condução na gota.

2.1.4 Método de descrição Euleriana do movimento da fase gasosa

As equações que descrevem a fase gasosa dentro da célula computacional adotam uma formulação Euleriana para as conservações de massa, quantidade de movimento, energia cinética turbulenta (k) e razão de dissipação (ϵ). Essas equações pressupõem que a escala espacial dos volumes de controle seja muito superior a das gotas (fase esparsa), mas negligenciável frente às variações das propriedades do gás. Estas duas hipóteses impõem uma importante contradição quanto ao refinamento da malha computacional. Para o motor utilizado aqui, o modelo de injeção introduz nos orifícios do bico injetor parcelas que agrupam três gotas de combustível, com um diâmetro de aproximadamente 0,2 mm cada uma. Em condições nas quais ambas as hipóteses são respeitadas, este volume de combustível recebe energia para a sua vaporização em diversas células computacionais próximas do orifício injetor, retirando uma pequena parte da energia interna de cada uma destas células. Contudo, caso uma parcela com volume que viole a hipótese de fase líquida esparsa venha a evaporar no interior de uma célula computacional demasiado pequena, tem-se uma instabilidade nos cálculos caracterizada por valores de energia interna e temperatura negativos no gás desta célula computacional. Isto acarretou o travamento do programa ao se adotar um espaçamento inferior a 1,5 mm para a malha computacional do motor MWM Sprint analisado.

As equações de conservação da fase gasosa são derivadas a partir de uma forma adequada da equação integral de transporte de Reynolds:

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{Vol(t)} \varphi \rho \, dvol + \int_{Sup} \varphi (\rho \vec{V} \cdot \hat{n} \, dA) \quad (2.9)$$

na qual \vec{V} representando a velocidade do fluido que atravessa a superfície do volume de controle (que varia com o tempo – $Vol(t)$). O vetor unitário \hat{n} , que aponta para fora do gás,

representa o elemento infinitesimal de superfície dA . O termo φ é uma propriedade intensiva conservada e Φ é o valor total (extensiva) desta propriedade do sistema.

Na região de *spray* denso ($\theta < 0,9$) é necessária a distinção entre a densidade microscópica do gás ρ_g (massa de gás por unidade de volume ocupado pelo gás) e a densidade macroscópica, $\rho = \rho_g \cdot \theta$ (massa de gás por unidade de volume ocupado pela mistura). Na ausência de gotas, a equação de conservação da massa da fase gasosa local é:

$$\int_{Vol_g} \left[\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u}) \right] dVol_g = 0 \quad (2.10)$$

que decorre da aplicação do teorema de Gauss à Equação 2.9. A segunda parcela do termo entre colchetes na Equação 2.10 representa a massa de gás que atravessa a superfície do volume de controle com velocidade \vec{u} . Na presença de gotículas, a Equação 2.10 torna-se:

$$\int_{Vol_g} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) \right] dVol_g = \int_{Sup_d} \rho_g (\vec{u} - \vec{w}) \cdot \vec{n}_d dA \quad (2.11)$$

Com a evaporação das gotas, a interface gás-gota move-se com velocidade \vec{w} , fazendo sua área superficial Sup_d variar com o tempo. A integral do lado direito da Equação 2.11 representa a fonte da massa de gás devido à evaporação das gotículas.

Aplicando-se a Equação 2.9 para uma única gota de uma parcela, obtém-se a taxa de variação da massa de líquido devido à evaporação:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \rho_l \right) = \int_{Sup_d} \rho_l (\vec{w} - \vec{v}) \cdot \vec{n}_d dA \quad (2.12)$$

Através da conservação de massa, nota-se que o lado direito das Equações 2.11 e 2.12 devem ser iguais. Assim, quando a Equação 2.12 é resolvida para todas as gotículas, a Equação 2.11 é modificada, chegando-se a uma forma final para a equação da conservação de massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = - \iiint \rho_l 4\pi r^2 R f dr d\vec{v} dT_d \quad (2.13)$$

De maneira similar são feitas considerações para as conservações do momento e da energia. A equação do momento para uma mistura de fluidos é dada por:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u_i \vec{u}) = -\nabla p - \nabla \left(\frac{2}{3} \rho k \right) + \nabla \cdot \vec{\tau} + F^s \quad (2.14)$$

na qual P é a pressão do fluido, F^s é a taxa de ganho de momento devido ao *spray* e $\vec{\tau}$ é o tensor de tensões viscosas na forma Newtoniana:

$$\vec{\tau} = \rho D \left[(\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^t) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{u} \vec{I} \right] \quad (2.15)$$

sendo \vec{I} o diádico unitário.

A equação da energia interna é dada por:

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u} U) = -P \nabla \cdot \vec{u} - \nabla \cdot \vec{J} + \rho \varepsilon + \dot{Q}^c + \dot{Q}^s \quad (2.16)$$

na qual U é a energia interna específica, excluindo-se efeitos de entalpia de formação, e \vec{J} é o vetor fluxo de calor, que inclui efeitos da condução de calor turbulenta e difusão de entalpia:

$$\vec{J} = -\lambda \nabla T - \rho D \sum_m h_m \nabla (\rho_m / \rho) \quad (2.17)$$

na qual λ é a condutividade térmica e h_m é a entalpia específica da espécie m . Ainda na Equação 2.16, os termos \dot{Q}^c e \dot{Q}^s são originados a partir da liberação de energia química e das interações de *sprays*, respectivamente.

O transporte turbulento de massa, momento e energia são controlados pelo coeficiente de difusão, o qual é calculado pelo KIVA como:

$$D = C_\mu k^2 / \varepsilon \quad (2.18)$$

na qual $C_\mu = 0,09$ é uma constante. Os termos k e ε são, respectivamente, a energia cinética turbulenta e a sua taxa de dissipação. Os transportes convectivo e difusivo dessas propriedades são determinados utilizando-se o modelo de turbulência $k\varepsilon$ convencional [11], usando as Equações 2.19 e 2.20:

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla(\rho k \vec{u}) = -\frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot \vec{u} + \vec{\tau} \cdot \vec{u} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{Pr_k} \right) \nabla k \right] - \rho \varepsilon + \dot{W}^s \quad (2.19)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla(\rho \varepsilon \vec{u}) = & -\left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3} \right) \rho \varepsilon \nabla \cdot \vec{u} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{Pr_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \\ & \frac{\varepsilon}{k} \left[C_{\varepsilon 1} \vec{\tau} : \nabla \vec{u} - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_s \dot{W}^s \right] \end{aligned} \quad (2.20)$$

As Equações 2.19 e 2.20 são as equações padrões do modelo $k\varepsilon$ acrescidas de alguns termos. O primeiro termo do lado direito da Equação 2.20 é o responsável pelas modificações na escala de comprimento quando há dilatação de velocidade. Os termos que envolvem a tensão de cisalhamento ($\vec{\tau}$) representam a geração de turbulência. O termo \dot{W}^s surge devido às interações com o *spray*. Adotaram-se as constantes $C_{\varepsilon 1}=1,44$, $C_{\varepsilon 2}=1,92$, $C_{\varepsilon 3}=-1,0$, $Pr_k=1,0$, $Pr_\varepsilon=1,3$ e $C_s=1,5$ de acordo com Amsdem *et al.* [11].

O transporte de cada espécie química m é considerado, após a solução das equações de movimento e da cinética química de combustão, por meio da Equação 2.21:

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \vec{u}) = \nabla \cdot \left[\rho D \nabla \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \right] + \dot{\rho}_m^c + \dot{\rho}^s \delta_{m1} \quad (2.21)$$

sendo $\dot{\rho}_m^c$ o termo fonte originário das reações químicas e $\dot{\rho}^s \delta_{m1}$ o termo fonte resultante da evaporação de combustível.

As reações químicas que ocorrem no sistema são simbolizadas por:

$$\sum_m a_{mr} x_m \rightleftharpoons \sum_m b_{mr} x_m \quad (2.22)$$

na qual x_m representa um mol da espécie m e a_{mr} e b_{mr} são os coeficientes estequiométricos para a reação r . Os coeficientes estequiométricos devem satisfazer a relação dada pela Equação 2.23:

$$\sum_m (a_{mr} - b_{mr})W_m = 0 \quad (2.23)$$

de modo que a massa é conservada nas reações químicas.

De acordo com os parâmetros de entrada do software KIVA, as reações podem ser divididas em duas classes: aquelas que procedem cineticamente e aquelas que consideram o equilíbrio. Para as reações químicas com cinética de não-equilíbrio, o software KIVA adota a taxa \dot{w}_r dada por:

$$\dot{w}_r = k_{fr} \prod_m (\rho_m/W_m)^{a'_{mr}} - k_{br} \prod_m (\rho_m/W_m)^{b'_{mr}} \quad (2.24)$$

Os coeficientes k_{fr} e k_{br} são tomados através de uma forma generalizada de Arrhenius:

$$k_{fr} = A_{fr} T^{\zeta_{fr}} \exp\left(\frac{-E_{fr}}{T}\right) \quad (2.25)$$

$$k_{br} = A_{br} T^{\zeta_{br}} \exp\left(\frac{-E_{br}}{T}\right) \quad (2.26)$$

na qual E_{fr} e E_{br} são os dados de entrada para as temperaturas de ativação. Já as taxas das reações de equilíbrio são determinadas implicitamente pelo KIVA através das condições de restrição:

$$\prod_m (\rho_m/W_m)^{b_{mr}-a_{mr}} = K_c^r(T) \quad (2.27)$$

na qual a constante de equilíbrio $K_c^r(T)$ é calculada pela forma:

$$K_c^r = \exp(A_r \ln T_A + B_r/T_A + C_r + D_r T_A + E_r T_A^2) \quad (2.28)$$

sendo $T_A = T/1000$.

A partir das Equações 2.22 até 2.28 o código KIVA original calcula taxas de progresso das reações cinéticas e de equilíbrio baseadas na hipótese de que cada célula computacional seja um reator perfeitamente misturado (*Well Stirred Reactor*) e que a ignição do combustível ocorra imediatamente após a sua temperatura superar um valor estabelecido pelo usuário. Estes procedimentos se mostraram inadequados para a previsão do desempenho e das emissões do motor diesel, tendo-se adotado outra formulação para o cálculo das taxas de reação no presente trabalho e que serão apresentadas posteriormente. Contudo, de posse das taxas de reação determinadas pelas Equações 2.24 e 2.27, ou pelos métodos apresentados adiante, pode-se calcular o termo fonte originário das reações químicas:

$$\dot{\rho}_m^c = W_m \sum_r (b_{mr} - a_{mr}) \dot{w}_r \quad (2.29)$$

e o termo de liberação de energia química na equação da energia resulta em:

$$\dot{Q}^c = \sum_r Q_r \dot{w}_r \quad (2.30)$$

na qual Q_r é o negativo do calor da reação no zero absoluto.

Os coeficientes de transporte no KIVA são determinados a partir de:

$$\mu = (1 - A_0)\rho v_0 + \mu_{air} + A_0 C_\mu k^2 / \varepsilon \quad (2.31)$$

$$\lambda = A_3 \mu \quad (2.32)$$

$$K = \frac{\mu c_p}{Pr} \quad (2.33)$$

$$D = \frac{\mu}{\rho Sc} \quad (2.34)$$

A difusividade ν_0 é um parâmetro de entrada. A relação de Sutherland é usada para μ_{air} :

$$\mu_{air} = \frac{A_1 T^{3/2}}{T + A_2} \quad (2.35)$$

com A_1 e A_2 constantes. A constante A_3 é tomada como $-2/3$ nos cálculos de fluxo turbulento, mas pode ser arbitrariamente especificada num fluxo laminar. Os números de Prandtl (Pr) e Schmidt (Sc) turbulentos são constantes de entrada para as quais adotaram-se os valores de 1/1,11.

2.1.5 Estrutura do código computacional

Os modelos apresentados nas seções 2.1.1 a 2.1.4 são inseridos na estrutura do código fonte por meio de rotinas que podem ser agrupadas em fases. O nome das rotinas padrões do código KIVA, estas fases e as iterações realizadas pelo programa são apresentadas na Figura 2.2. As funções sublinhadas (*timstp*, *inject*, *chem* e *break*) foram redesenhadas neste trabalho.

A rotina *timstp*, que controla o passo de tempo computacional, foi alterada incluindo-se um limite para o incremento de tempo baseado na variação de temperatura devido à cinética química de pré-ignição. Estabeleceu-se que não ocorram variações de temperatura superiores a 10°C em qualquer uma das células computacionais, assegurando-se a convergência e precisão do algoritmo de integração das equações diferenciais de taxa de reação.

A rotina *inject* lança as parcelas no domínio de cálculo de acordo com uma curva experimental de taxa de injeção de combustível. O modelo *blob injection* adotado neste trabalho introduz gotículas de até 220 μm de diâmetro, as quais possuem um volume considerável. Por isto foi necessária a introdução de uma restrição quanto ao número total de parcelas injetadas a cada passo de tempo nesta rotina, evitando-se a introdução de parcelas com um número de gotículas inferior a unidade no domínio de cálculos, o que não teria um significado físico.

O modelo padrão do código KIVA para a quebra do jato de combustível, que consta na rotina *break*, é a analogia de Taylor (TAB – *Taylor Analogy Breakup*). Este modelo é capaz de reproduzir com precisão o fenômeno de quebra em injetores cônicos de um orifício, os quais são tipicamente utilizados em motores de ignição por centelha. Contudo, este bom desempenho não se repete para injetores diesel com múltiplos orifícios. Por este motivo, o modelo de quebra híbrido Blob + Kelvin-Helmholtz + Rayleigh-Taylor foi implementado na rotina *break* no presente trabalho.

Conforme se comentou, a rotina original para a modelagem da combustão (*chem*) baseia-se nas hipóteses de reator pré-misturado e de ignição instantânea por barreira de temperatura. Com as grades computacionais adotadas para a simulação de motores diesel (arestas máximas da ordem de 1 mm), a hipótese de reator homogêneo não conduz a uma aproximação válida para a chama difusiva turbulenta, o que faz com que o código KIVA não-modificado antecipe a liberação de energia da combustão com relação à dados experimentais. Além disto, o fato do software original não contar com um mecanismo de cinética química de pré-ignição, e sim com uma temperatura de corte a partir da qual se considera que a mistura entrou em ignição, torna-o incapaz de prever o intervalo entre o início da interação combustível/comburente e a combustão desta mistura em cada célula computacional (atraso da ignição). Para se contornar estas dificuldades, algumas modificações foram introduzidas na rotina original. Incorporou-se o mecanismo reduzido de cinética química de pré-ignição proposto por Kong e Reitz [24], o qual é capaz de prever com precisão o atraso de ignição em cada célula computacional em função de seu histórico de pressão, temperatura e composição. Os efeitos da não-homogeneidade dos reagentes e das flutuações turbulentas presentes em cada célula computacional foram levados em conta empregando-se um novo modelo híbrido (Arrhenius/dissipação turbulenta) para o cálculo de taxas de reação envolvidas na combustão. Detalhes a respeito de cada uma das modificações introduzidas no software KIVA original são discutidas no Capítulo 4.

Fase	Funções	Rotinas
Inicialização	Ler dados de entrada Geração da malha Calcula a viscosidade gasosa Inicializa passo de tempo e velocidade do pistão	<i>begin, rinput, setup, <u>timstp</u>, newcyc</i>
A	Modelagem do spray (injeção de combustível, quebra do jato, colisão de gotas, evaporação...) Química de combustão Modelagem de emissão de poluentes Contribuição de massa e energia devido ao spray e combustão	<i><u>inject</u>, pmovtv, atomize, <u>break</u>, collide, evap, lawall, <u>chem</u>, chemeq, pmom, pcoupl, repack</i>
B	Cálculo da fase fluida Massa, momento, velocidade, pressão, temperatura, propriedades da turbulência Resolução das iterações Atualização da velocidade da gota	<i>ysolve, exdif, vsolve, psolve, tsolve, pgrad, kesolve, paccel</i>
C	Rezoneamento da malha Remapeamento das propriedades para a nova malha Atualiza as propriedades dentro das células	<i>rezone, volume, ccflux, momflux, chop, state</i>

Figura 2.2. Estrutura computacional do código KIVA (adaptado a partir de [25])

2.2 Análise de liberação de energia

A complexidade dos fenômenos que ocorrem na câmara de combustão do motor agrega muitas incertezas e dificuldades tanto nos procedimentos de simulação, quanto em estudos fenomenológicos e experimentais do processo de queima. Contudo, uma ferramenta específica de análise tem participado de todo o processo de desenvolvimento dos motores de combustão interna, desde os seus primórdios, a análise de liberação de energia (*Heat Release Analysis*) [26-30]. A aplicação desta técnica consiste na obtenção de dados experimentais de pressão seguida da aplicação destes dados em balanços de energia nos cilindros do motor, a partir dos quais se calcula o avanço global da reação de queima [31]. Dados de pressão no cilindro em função do ângulo de manivela do pistão também têm sido bastante utilizados para validação das simulações [13].

O cálculo da liberação de energia utilizado neste trabalho segue a hipótese de uma zona de combustão enunciada por Krieger e Borman [30]:

- O combustível é vaporizado e queimado instantaneamente ao adentrar o cilindro, de modo que sua taxa de injeção é igual a sua taxa de queima;
- O fluido de trabalho é uma mistura homogênea de gases de combustão sujeita a um processo quase-estático, ou seja, uma mistura de gases ideais que passa por uma sucessão de estados de equilíbrio;
- Os componentes do fluido de trabalho são CO_2 , H_2O , N_2 , CO e H_2 sempre em equilíbrio químico.

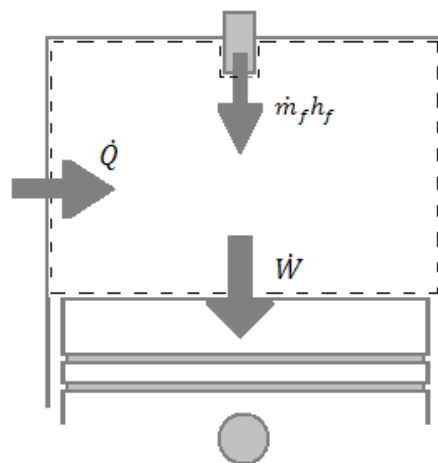


Figura 2.3. Balanço de energia no cilindro do motor

O balanço de energia no volume de controle do cilindro mostrado na Figura 2.3 resulta em:

$$\dot{Q} + \dot{m}_f h_f = \frac{dU}{dt} + \dot{W} \quad (2.36)$$

na qual \dot{Q} é a taxa de transferência de calor líquida em toda a fronteira do sistema, \dot{W} é a taxa de transferência do trabalho feito pela expansão do sistema, \dot{m}_f é a taxa de massa de combustível que atravessa a fronteira do sistema, h_f é a entalpia específica do fluxo de massa e U é a energia interna do sistema. As principais incertezas associadas à aplicação da Equação 2.36 para motores diesel são a evaporação e a distribuição não uniforme do combustível no cilindro, além de gradientes de composição e temperatura nos gases queimados. Costuma-se agregar o termo aparente à taxa de queima de combustível calculada a partir dos dados experimentais de pressão devido a estas duas incertezas que caracterizam o seu cálculo.

Apesar destas dificuldades, a análise da liberação de energia não necessita de ajustes de parâmetros em sub-modelos de combustão e tem um forte embasamento experimental, pois seu principal parâmetro de entrada é um diagrama de pressão determinado a partir da operação do motor em bancada dinamométrica. Por este motivo, utilizaram-se dados de liberação de energia para auxiliar na validação de constantes dos modelos de combustão e quebra de jato implementados nas simulações multidimensionais. Qualitativamente, a solução da Equação 2.36 fornece a quantidade de energia química que deve ser convertida pelo processo de combustão para se contrabalancear a pressão de combustão experimental. Calcula-se, desta forma, a taxa mássica aparente de combustível queimado em função do ângulo de manivela θ [32]:

$$\frac{dm_b}{d\theta} = \left(\frac{pV}{RT(\phi + a_{st})} \right) \frac{d\phi}{d\theta} \quad (2.37)$$

na qual a temperatura instantânea (T) e a relação de equivalência combustível-ar instantânea (ϕ) são dadas por:

$$\frac{dT}{d\theta} = \frac{\frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} + \left(\frac{1}{P} - \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial P}\right) \frac{dP}{d\theta} - \left(\frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial \phi} + \frac{1}{a_{st} + \phi}\right) \frac{\partial \phi}{\partial \theta}}{\frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial T} + \frac{1}{T}} \quad (2.38)$$

$$\frac{d\phi}{d\theta} = \frac{\left(\frac{RT + A}{V}\right) \frac{dV}{d\theta} - \frac{RT}{PV} \frac{dQ}{d\theta} + \left(\frac{A}{P} - \frac{A}{R} \frac{\partial R}{\partial P} + \frac{du}{dP}\right) \frac{dP}{d\theta}}{\frac{A}{R} \frac{\partial R}{\partial \phi} + \frac{(A + h_f - u)}{\phi + a_{st}}} \quad (2.39)$$

sendo o parâmetro A dado em função da energia interna específica u :

$$A = \frac{\frac{\partial u}{\partial T}}{\frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial T} + \frac{1}{T}} \quad (2.40)$$

A taxa de transferência de calor pelas fronteiras do sistema foi calculada empregando-se a correlação de Annand e Ma [33]. As propriedades do fluido de trabalho foram determinadas com a rotina PER de Olikara e Borman [34]. Maiores detalhes sobre o programa computacional aplicado na análise de liberação de energia podem ser encontrados na referência [32].

3 DADOS EXPERIMENTAIS E PROPRIEDADES DOS COMBUSTÍVEIS

3.1 Aparato experimental aplicado nos ensaios dinamométricos

A obtenção dos dados experimentais de pressão no cilindro, torque, rotação e emissões poluentes do motor é parte de um trabalho prévio do orientador e do co-orientador desta dissertação. Deste modo, são descritos seguir apenas os aspectos da montagem experimental que são relevantes para a validação das simulações: o motor, os combustíveis e as incertezas de medição.

As simulações multidimensionais foram conduzidas com um motor diesel rápido MWM 6.07T GMT-400 turboalimentado, cujas especificações são apresentadas na Tabela 3.1. Um dinamômetro e um sistema de bancada de testes automáticos foram empregados no controle do motor e na aquisição de seus principais parâmetros operacionais. O consumo de combustível foi determinado utilizando-se uma balança gravimétrica. Já as temperaturas do fluido de arrefecimento e da alimentação de combustível foram controladas com trocadores de calor do tipo casco-tubo. Um transdutor piezométrico miniatura AVL GM 12 D montado sobre a reentrância do pistão foi utilizado para a medição da pressão no cilindro. Os dados de pressão no cilindro foram calculados a partir de uma média de 56 ciclos consecutivos, com uma resolução de meio grau de ângulo de manivela. A posição angular do ponto morto superior foi calibrada dinamicamente, utilizando-se um sensor capacitivo. Maiores detalhes acerca da montagem experimental adotada podem ser obtidos na referência [35].

A precisão nas medições de variáveis operacionais é apresentada na Tabela 3.2. A incerteza apresentada para a pressão no cilindro foi calculada considerando-se a precisão do sistema combinado, formado pelo transdutor de pressão, por um amplificador de carga e pelo sistema da aquisição de dados.

O éster metílico do óleo de mamona foi analisado como substituto parcial para o óleo diesel mineral em concentração de 20% em volume (mistura B20). O combustível base utilizado é um óleo diesel de baixo teor de enxofre (0,05%). Na Tabela 3.3 são apresentadas características termoquímicas relevantes para o óleo diesel mineral (as quais foram aproximadas às do n-dodecano), para a mistura B20 e para o biodiesel de mamona puro (as quais foram aproximadas às do éster metílico do ácido ricinoléico). As aproximações aqui

adotadas são justificadas na seção 3.2. As fórmulas empíricas e demais propriedades foram obtidas através do processamento de dados obtidos em cromatografia. Devido à presença de oxigênio em sua composição e da menor razão C/H, a adição de biodiesel provoca uma redução no conteúdo energético do combustível e na razão mássica ar-combustível necessária para a queima estequiométrica (af_{st}). Para a mistura B20, observam-se reduções de 3,4% no conteúdo energético e de 5,4% na fração de ar necessária para queima estequiométrica, além de elevações de 27,3% na viscosidade e 3,5% na densidade.

Tabela 3.1. Especificações do motor

Configuração	4 tempos injeção direta turboalimentado
Número de cilindros / cilindrada [dm ³]	6 / 4,2
Curso X Diâmetro [m]	0,103 X 0,093
Razão de compressão	17,8:1
Pressão de Abertura (1° / 2° Estágio) [bar]	220/300
Potência Máxima [kW]	123,0 a 3400rpm

Tabela 3.2. Precisão nas medições

Medição	Precisão de medição em fim de escala
Potência de frenagem [kW]	±0,32
Consumo mássico de combustível [g/h]	±192
Consumo volumétrico de ar [m ³ /h]	±6
Pressão indicada [bar]	±0,67

Tabela 3.3. Propriedades dos combustíveis considerados nas simulações

Combustível (Fórmula empírica)	Biodiesel (em volume)	af_{st} (m_{ar}/m_f) _{st}	Densidade [kg/m ³]	Viscosidade [m ² /s a 40°C]	Exergia [MJ/kg]
Óleo Diesel (C ₁₂ H ₂₆ O ₀)	0 %	14,94	748,75	2,60.10 ⁻²	44,98
B20 (C _{12,9} H _{27,2} O _{0,45})	20 %	14,13	775,06	3,31.10 ⁻²	43,45
B100 (C ₁₈ H ₃₄ O ₃)	100 %	11,52	924,50	14,51.10 ⁻²	38,48

3.2 Propriedades do biodiesel de mamona

A descrição precisa das propriedades físico-químicas do combustível é imprescindível para a realização de simulações em motores. Chang e Farrell [36] demonstraram, por exemplo, que propriedades físicas do combustível, como a viscosidade, podem afetar severamente a combustão e a emissão de poluentes. Também não é difícil observar que a pulverização do jato e a subsequente vaporização das gotículas de combustível sofrem forte influência de outras propriedades tais como a densidade, a entalpia de vaporização, pressão de vapor, condutividade térmica e a tensão superficial.

O software KIVA possui uma biblioteca razoável de combustíveis para hidrocarbonetos de origem fóssil e álcoois, todavia não há quaisquer dados para biodiesel. De fato, nem sempre há disponibilidade na literatura de dados experimentais das principais propriedades de biocombustíveis de cadeia longa, além de que os processos de determinação destes dados apresentam alto custo. Recentemente, nota-se algum progresso nesta área com a aplicação de modelos teóricos para o cálculo de propriedades termofísicas de biocombustíveis, tais como o método da contribuição de grupos. Allen *et al.* [36, 37], por exemplo, previram a tensão superficial e viscosidade de 15 diferentes biocombustíveis, mas em um único ponto de temperatura. Yuan *et al.* [38] compilaram alguns métodos para o cálculo de propriedades do biodiesel, em uma ampla faixa de temperaturas, a partir de sua composição de ácidos graxos. Este tipo de modelagem é bastante promissor, tendo sido reportados desvios da ordem de apenas 1% para a maior parte das propriedades do biodiesel [38]. Tendo-se como motivação estes casos bem sucedidos presentes na literatura, adotou-se o conjunto de métodos teóricos descritos a seguir para a obtenção das propriedades termofísicas do biodiesel de mamona, além da mistura B20, necessárias para a realização das simulações do jato de combustível.

3.2.1 A estrutura considerada para a cadeia do biodiesel

O biodiesel do óleo de mamona costuma ser obtido através da reação química de transesterificação, onde o óleo vegetal reage com o metanol ou etanol na presença de um

catalisador, tendo como produtos o glicerol e os ésteres metílicos de ácidos graxos (biodiesel). O método da contribuição dos grupos foi utilizado aqui para a obtenção da maior parte das propriedades do biodiesel de mamona. As propriedades do biodiesel de mamona foram aproximadas pelas do éster metílico do ácido ricinoléico, o qual responde por cerca de 90% de sua composição [39]. O éster metílico do ácido ricinoléico possui a seguinte fórmula: $C_{18}H_{34}O_3$ e recebe, de acordo com a nomenclatura IUPAC (*International Union of Pure and Applied Chemistry*), a denominação *ácido 12-hidroxi-9-octadecenóico*. A estrutura da cadeia deste biocombustível é apresentada na Figura 3.1.

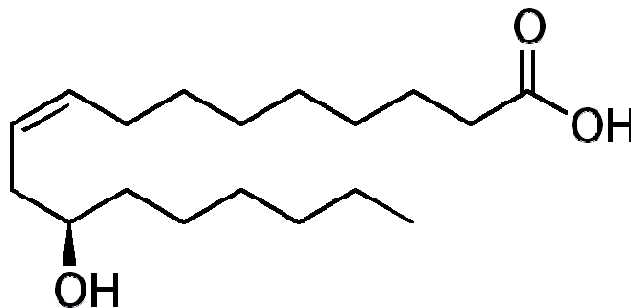


Figura 3.1. Estrutura molecular do ácido graxo ricinoléico (composto predominante no biodiesel de mamona)

3.2.2 Propriedades críticas

No método da contribuição de grupos, as propriedades de uma substância são colocadas em função da sua estrutura molecular, a qual é dividida em diversos grupos (subestruturas a serem identificadas). A parcela correspondente a cada um destes grupos no valor final de uma propriedade é dada pelo produto entre o número de vezes que um mesmo grupo aparece na estrutura molecular e o valor individual atribuído à sua contribuição. Em seguida, calcula-se o valor final da propriedade efetuando-se um somatório das parcelas de cada um dos grupos identificados [40, 41]. Um dos primeiros métodos de contribuição de grupos que obteve sucesso na estimativa de propriedades críticas foi apresentado em 1955 por Lydersen [42]. Desde então, tem-se modificado e ampliado este método com o fim de se

abranger uma quantidade cada vez maior de compostos e estruturas moleculares de maior complexidade.

Para superar restrições relacionadas a distinção de grupos com configurações especiais como os isômeros, Constantinou e Gani [43] estenderam o método de contribuição de grupos dividindo-o em dois níveis e incorporando funções mais sofisticadas das propriedades desejadas. Segundo comparações realizadas por Poling *et al.* [44], podem-se atribuir incertezas entre 0,1% a 2,2% para a predição da temperatura normal de ebulição e das propriedades críticas ao se utilizar o método da contribuição de grupos de Constantinou/Gani (CG). A formulação geral do método CG propõe que uma dada propriedade F seja função do somatório das parcelas dos grupos de primeira ordem (F_{1k}) e de segunda ordem (F_{2j}):

$$F = f \left[\sum_k N_k F_{1k} + W \cdot \sum_j M_j F_{2j} \right] \quad (3.1)$$

na qual f pode ou não ser uma função linear, N_k é o número de grupos de primeira ordem do tipo k e M_j são os números de grupos de segunda ordem do tipo j presentes na molécula. O valor de W é igual zero para cálculos somente com grupos de primeira ordem e igual à unidade para cálculos com contribuições de segunda ordem.

A temperatura crítica (T_c), a pressão crítica (P_c) e o volume crítico (V_c) são, então, dados pelas correlações:

$$T_c = 181,128 \ln \left[\sum_k N_k t_{c1k} + W \cdot \sum_j M_j t_{c2j} \right] \quad (3.2)$$

$$P_c = \left[\sum_k N_k p_{c1k} + W \cdot \sum_j M_j p_{c2j} + 0,10022 \right]^{-2} + 1,3705 \quad (3.3)$$

$$V_c = -0,00435 + \left[\sum_k N_k v_{c1k} + W \cdot \sum_j M_j v_{c2j} \right] \quad (3.4)$$

Os valores das contribuições dos grupos para a temperatura crítica (t_{c1k} e t_{c2j}), para a pressão crítica (p_{c1k} e p_{c2j}) e para o volume crítico (v_{c1k} e v_{c2j}) foram retirados das Tabelas C-2 e C-3 da referência [44].

Para o cálculo da temperatura normal de ebulição T_b (em 1 atm), também foi utilizado o método CG através da seguinte correlação baseada nas contribuições de grupos:

$$T_b = 204,359 \ln \left[\sum_k N_k t_{b1k} + W \cdot \sum_j M_j t_{b2j} \right] \quad (3.5)$$

na qual as contribuições t_{c1k} e t_{c2j} para a temperatura de ebulição também foram retiradas das Tabelas C-2 e C-3 [44]. Em todos os cálculos foram consideradas as contribuições de grupos de segunda ordem ($W=1$). Os valores obtidos para cada uma das propriedades consideradas pelo método CG estão expostos na Tabela 3.4.

Tabela 3.4. Propriedades críticas e ponto de ebulição do biodiesel de mamona

Propriedade	Valor obtido através do método CG
Temperatura normal de ebulição [K]	645,6626
Temperatura crítica [K]	811,2076
Pressão crítica [bar]	12,7527
Volume crítico [m ³ /kmol]	1,0617

As propriedades críticas e a temperatura normal são utilizadas como dados de entrada em correlações empregadas para o cálculo de tabelas contendo as principais características físico-químicas do biodiesel. As unidades destas tabelas são apresentadas de acordo com o sistema utilizado pelo código KIVA, o CGS. Nota-se, portanto, que a exatidão na determinação das propriedades críticas e da temperatura normal é muito importante para a correta modelagem da influência do biodiesel nos processos de quebra de jato de combustível e vaporização. Por este motivo, as propriedades obtidas com o método CG foram comparadas a outras alternativas de cálculo na Tabela 3.5, confirmando a boa aproximação dos resultados obtidos através deste método.

Tabela 3.5. Comparação das propriedades obtidas através de outros métodos

Método	Propriedade	Valor obtido
Contribuição de grupos (Nannoolal <i>et al.</i>) [45]	Temperatura normal de ebulição [K]	630,9739
Método das correlações (Yuan <i>et al.</i>) [46]	Temperatura normal de ebulição [K]	624,5843
Contribuição de ligações de Marrero-Pardillo [40]	Temperatura crítica [K]	806,3996
	Pressão crítica [bar]	12,7006
	Volume crítico [m ³ /kmol]	1,0689

3.2.3 Condutividade térmica

Todas as técnicas de avaliação da condutividade térmica de líquidos são empíricas [44]. Baroncini *et al.* [47] sugeriram uma correlação para o cálculo da condutividade térmica (λ) de líquidos:

$$\lambda = \frac{A(1 - T_r)^{0,38}}{T_r^{1/6}} \quad (3.6a)$$

na qual T_r é a temperatura reduzida. O fator A é dado em função do ponto de ebulição normal T_b , da temperatura crítica T_c e da massa molar MM :

$$A = \frac{A^* \cdot T_b^\alpha}{MM^\beta \cdot T_c^\gamma} \quad (3.6b)$$

Os parâmetros A^* , α , β e γ são dados na Tabela 10-4 da referência [44] para diversos componentes orgânicos. No caso do biodiesel, os valores utilizados foram os valores dados para os ésteres ($A^* = 0.0415$; $\alpha = 1.2$; $\beta = 1.0$; $\gamma = 0.167$). Os resultados obtidos para a condutividade térmica do biodiesel com a correlação proposta por Baroncini *et al.* [47] são apresentados na Figura 3.2.

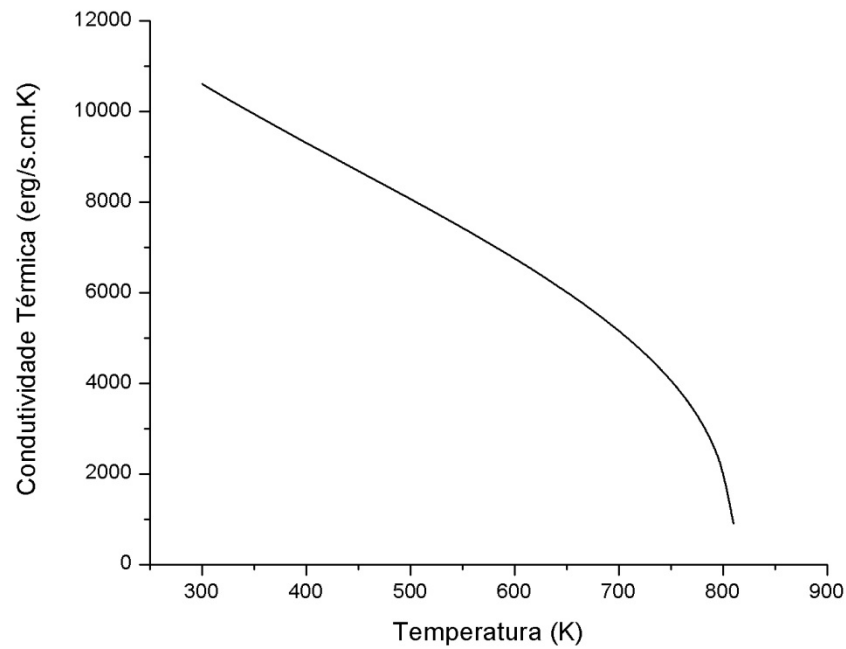


Figura 3.2. Dados tabulados de condutividade térmica em função da temperatura

3.2.4 Pressão de vapor

Quando a fase líquida e a fase gasosa de uma substância entram em equilíbrio termodinâmico, a pressão exercida pela fase gasosa é chamada de pressão de vapor. Uma aproximação amplamente utilizada para esta propriedade é dada pela equação de Antoine [48]:

$$\ln P_v = A_{ant} + \frac{B_{ant}}{T + C_{ant}} \quad (3.7)$$

na qual P_v é a pressão de vapor e T a temperatura em Kelvins. Os termos A_{ant} , B_{ant} e C_{ant} são parâmetros ajustáveis conhecidos como coeficientes de Antoine. Devido à grande dificuldade de se encontrar dados para o ácido ricinoléico (éster metílico de ácido graxo predominante no biodiesel de mamona) foram utilizados coeficientes de Antoine para os ésteres etílicos de

ácido graxo (EEAG) do óleo de mamona [49]. Estes dados são apresentados na Tabela 3.6. A Figura 3.3 mostra os resultados obtidos para a pressão de vapor do biodiesel em função da temperatura.

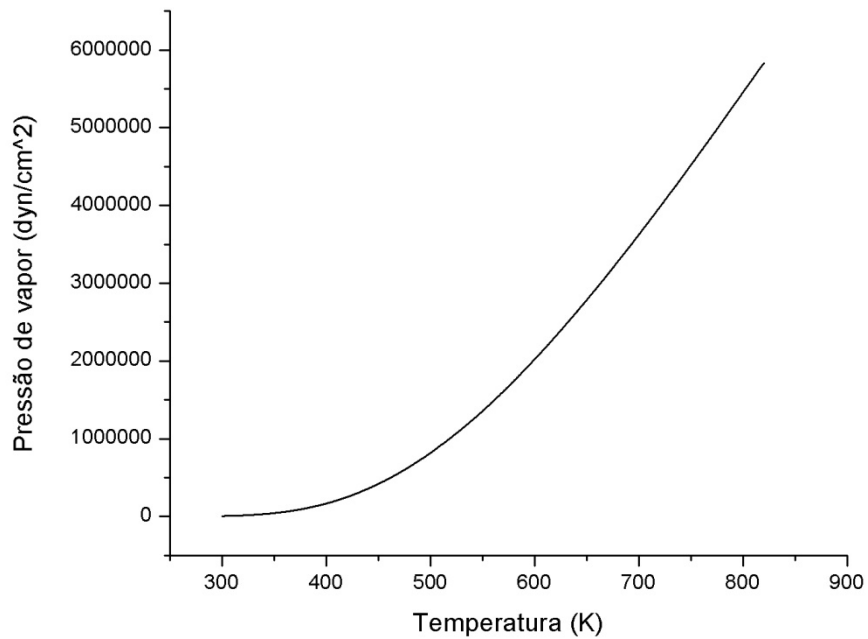


Figura 3.3. Pressão de vapor em função da temperatura

Tabela 3.6. Coeficientes de Antoine

	A_{ant}	B_{ant}	C_{ant}
EEAG (óleo de mamona)	15,5076	-1523,20	-137,32

3.2.5 Calor latente de vaporização

O calor latente de vaporização, também chamado de entalpia de vaporização, é a diferença de entalpia entre o estado de vapor saturado e o estado de líquido saturado. O calor latente de vaporização à temperatura normal de ebulição (ΔH_{vb}) pode ser estimado a partir de

relações com a pressão de vapor [50 – 53], ou com a correlação que também inclui a temperatura reduzida no ponto de ebulição T_{br} [54]:

$$\Delta H_{vb} = 1,093 R T_c T_{br} \frac{\ln P_c - 1,013}{0,93 - T_{br}} \quad (3.8)$$

sendo R a constante universal dos gases ideais.

O calor latente de vaporização decresce com o aumento da temperatura e é nulo no ponto crítico. A variação deste valor de energia em função da temperatura foi obtida pela correlação de Watson [55] a partir de um valor de entalpia já conhecido:

$$\Delta H_{v2} = \Delta H_{v1} \left(\frac{1 - T_{r2}}{1 - T_{r1}} \right)^n \quad (3.9)$$

na qual os índices 1 e 2 referem-se às temperaturas T_{r1} (onde a entalpia de vaporização foi calculada para T_{br} , empregando-se a Equação 3.8) e T_{r2} (onde a entalpia de vaporização deve ser calculada). Na Figura 3.4 observa-se o comportamento da entalpia de vaporização com a variação de temperatura.

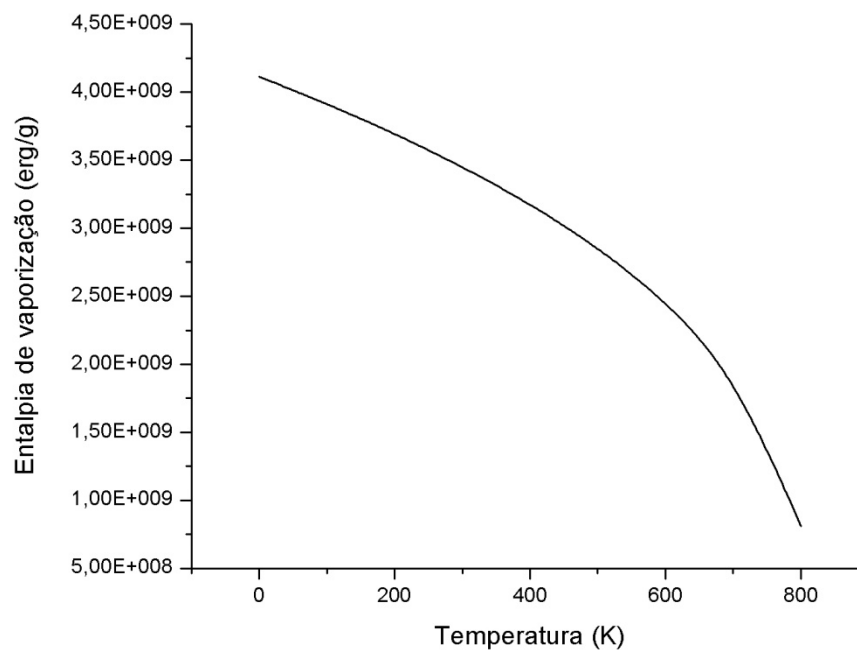


Figura 3.4. Calor latente de vaporização em função da temperatura

3.2.6 Tensão superficial

A tensão superficial σ de um líquido em equilíbrio com seu vapor diminui com a temperatura, até se anular no ponto crítico, o que causa um colapso da gotícula de combustível. Dependendo das características no cilindro, este pode ser o fim de uma parcela de gotículas. Nota-se, portanto, a importância de se determinar com precisão a temperatura crítica do combustível e a forma funcional da tensão superficial com a temperatura. Em 1894, Van der Waals [56] sugere que o termo adimensional $\sigma/P_c^{2/3}T_c^{1/3}$ é correlacionado ao termo $(1 - T_r)$. A partir desta idéia, Brock e Bird [57] desenvolveram a seguinte correlação para líquidos apolares como o biodiesel:

$$\sigma = P_c^{2/3}T_c^{1/3}Q^*(1 - T_r)^{11/9} \quad (3.10a)$$

$$Q^* = 0,1196 \left[1 - \frac{T_{br} \ln(P_c/1,01325)}{1 - T_{br}} \right] - 0,279 \quad (3.10b)$$

A Figura 3.5 mostra a forma funcional decrescente da tensão superficial com relação à temperatura para o éster metílico do ácido ricinoléico.

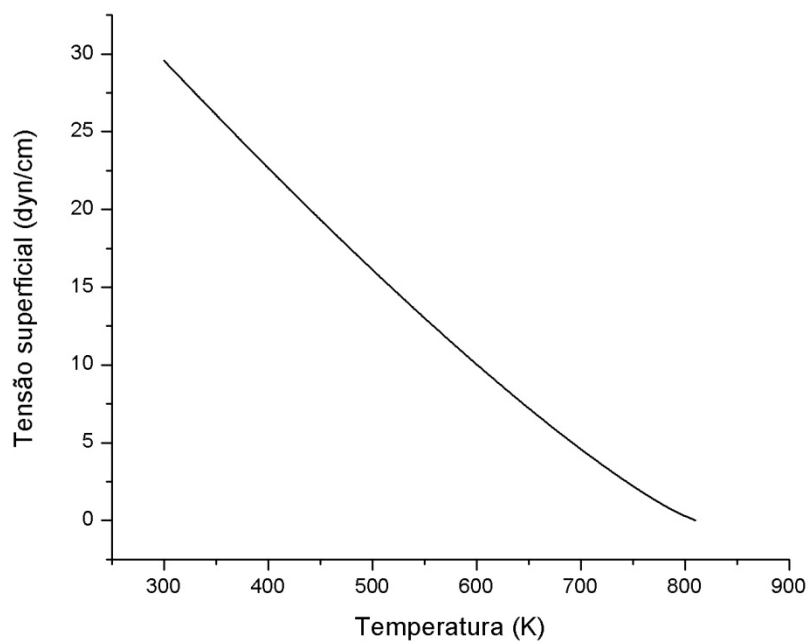


Figura 3.5. Tensão superficial em função da temperatura

3.2.7 Viscosidade

Para baixas temperaturas, as correlações existentes para predição da viscosidade líquida são, geralmente, funções lineares do inverso da temperatura absoluta. Para valores de temperatura mais elevados, costuma-se aplicar o princípio dos estados correspondentes, que afirma que propriedades de qualquer substância seguem as alterações de variáveis de estado adequadas. Sastri [58] recomenda a seguinte correlação para a viscosidade v :

$$\ln v = \left[\frac{\ln v_b}{\ln(\alpha v_b)} \right]^{\Phi} \ln(\alpha v_b) \quad (3.11a)$$

na qual o parâmetro α é uma constante que tem valor 0,1175 para os álcoois e 0,248 para os demais compostos [44]. O expoente Φ é função das temperaturas reduzidas no ponto normal de ebulição (T_b) e em ponto de temperatura T qualquer:

$$\Phi = \frac{1 - T_r}{1 - T_{br}} \quad (3.11b)$$

O termo v_b representa a viscosidade do fluido no ponto normal de ebulição que foi determinada através do método da contribuição de grupos de Sastri-Rao [58], onde Δv_{bi} é a contribuição do grupo i e n_i é o número de vezes que este grupo aparece na estrutura molecular do composto:

$$v_b = \sum_i n_i \Delta v_{bi} \quad (3.12)$$

Os valores das contribuições de cada grupo foram retirados da Tabela 9-10 da referência [44]. Os resultados obtidos para a viscosidade do ácido ricinoléico são apresentados na Figura 3.6.

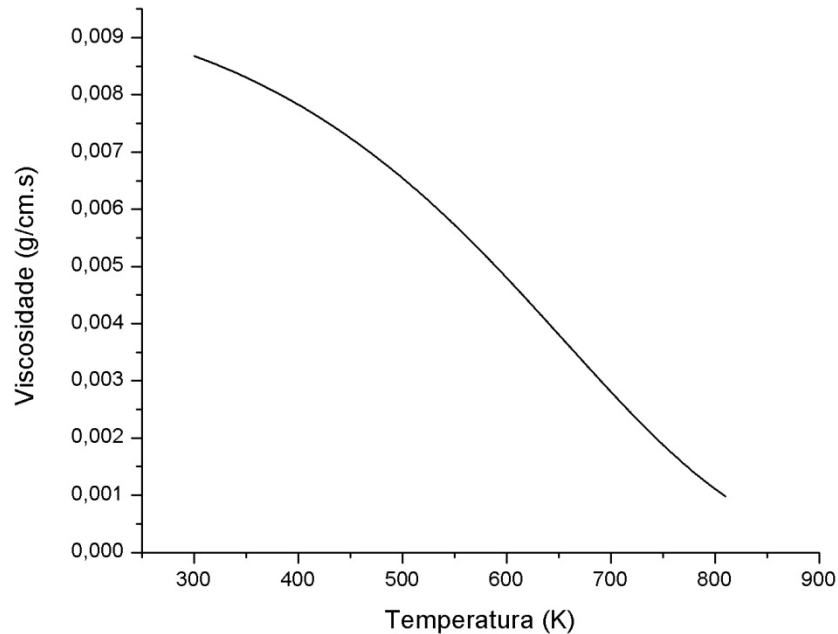


Figura 3.6. Viscosidade em função da temperatura

3.3 Propriedades da mistura B20

Para fins de cálculo de propriedades termofísicas, considerou-se o n-dodecano como combustível base, ou seja, como o combustível equivalente para o cálculo das propriedades do óleo diesel comercial. A pressão, o volume crítico e a temperatura normal de ebulição do n-dodecano também foram determinados empregando-se o método CG, para as demais propriedades deste combustível adotaram-se tabelas de propriedades do próprio software KIVA [10-12]. A Tabela 3.7 traz as propriedades críticas para o n-dodecano.

Tendo-se obtido todas as propriedades relevantes para o biodiesel de mamona (éster metílico do ácido ricinoléico) e para o óleo diesel (n-dodecano), deve-se agora compor as propriedades de cada um destes combustíveis de modo a se obterem os valores correspondentes à mistura B20. As propriedades críticas de cada combustível foram incorporadas na mistura B20 através da Equação de Lee-Kesler [59]. Na Tabela 3.8 são apresentados os valores obtidos para as propriedades críticas da mistura B20, além das

propriedades críticas correspondentes a uma ponderação direta em base molar. Da comparação entre estes valores, nota-se que a hipótese de mistura ideal poderia ter sido aplicada com uma precisão razoável pelo menos para a determinação das propriedades críticas. De fato, as demais propriedades da mistura B20 (viscosidade, entalpia de vaporização, pressão de vapor, condutividade térmica e a tensão superficial) foram aproximadas através da ponderação em base molar das propriedades do dodecano e do éster metílico do ácido ricinoléico. Nota-se que o valor obtido para a temperatura crítica da mistura B20 foi 682,79 K, que é um valor superior aos 660,18 K obtidos para o dodecano (Tab. 3.7). As propriedades do dodecano foram extrapoladas linearmente entre a sua temperatura crítica e a correspondente à mistura B20, para que fosse possível realizar a ponderação de propriedades nesta faixa de temperaturas.

Tabela 3.7. Propriedades críticas e temperatura normal de ebulição do n-dodecano

Propriedade	Valor obtido através do método CG
Temperatura normal de ebulição [K]	490,1021
Temperatura crítica [K]	660,1800
Pressão crítica [bar]	17,8924
Volume crítico [m ³ /kmol]	0,7037

Tabela 3.8. Propriedades críticas da mistura B20

Propriedade	Equação de Lee-Kesler	Mistura ideal	Desvio [%]
Temperatura crítica [K]	682,03	682,79	0,11
Volume crítico [m ³ /kmol]	0,7541	0,7573	0,41

4 MODELOS NUMÉRICOS IMPLEMENTADOS

Estão descritas, nas seções 4.1 a 4.3, as alterações e implementações realizadas no código original KIVA para que os objetivos específicos deste trabalho pudessem ser atingidos.

4.1 Modelo de formação de jato de combustível

A formação do jato de combustível foi simulada com um modelo híbrido *Blob-Kelvin-Helmholtz* implementado pelo autor da dissertação. O software Kiva utiliza um método estocástico baseado em grupos de gotículas idênticas denominadas parcelas, cuja trajetória é seguida utilizando-se uma formulação Lagrangeana [12]. Utilizaram-se 10.000 parcelas injetadas a cada ciclo do motor, com um ângulo inicial nulo com relação à direção normal ao orifício do bico e um diâmetro de 210 μm . O modelo proposto por Kuensberg *et al.* [60] (*Enhanced Blob-Method*) foi empregado para se determinar a velocidade de injeção efetiva, tendo-se levado em consideração a redução do diâmetro efetivo do orifício do bico (d_{noz}) devido aos efeitos da turbulência e da cavitação no canal de saída do injetor.

Logo após deixarem o orifício do bico injetor, as gotículas de combustível passam por um processo de quebra primária no interior do núcleo intacto, uma região do *spray* bastante densa devido à grande massa de líquido. A energia necessária à quebra primária provem de três fontes de instabilidades distintas: cavitação no interior do bico injetor; turbulência no canal de saída do bico injetor; forças aerodinâmicas provenientes da velocidade relativa entre as gotas e a atmosfera do cilindro. Reitz propôs um modelo de quebra primária baseado nos efeitos aerodinâmicos [61], os quais foram modelados através de instabilidades de Kelvin-Helmholtz (KH). Neste modelo, os efeitos da cavitação e da turbulência no injetor devem ser levados em conta de forma indireta, através do ajuste de constantes de calibração. As instabilidades KH originam pequenos deslocamentos na superfície do núcleo líquido do jato que compõem um espectro senoidal:

$$\eta = \eta_0 e^{\omega t} \quad (4.1)$$

na qual a taxa de crescimento ω representa o aumento da amplitude da perturbação na superfície do jato por unidade de tempo e η_0 é a amplitude inicial. A taxa de crescimento depende do comprimento de onda, contudo, para efeitos de cálculo, considera-se que somente a taxa de crescimento mais rápida Ω_{KH} ocasiona o desmembramento do jato em gotas. As Equações 4.2 trazem as correlações para essa taxa de crescimento e comprimento de onda correspondente utilizados no modelo KH proposto por Reitz [61]:

$$\Omega_{KH} \left[\frac{\rho_l r_0^3}{\sigma} \right]^{0,5} = \frac{0,34 + 0,38 We_g^{1,5}}{(1 + Oh)(1 + 1,4 T^{0,6})} \quad (4.2a)$$

$$\frac{\Lambda_{KH}}{r_0} = 9,02 \frac{(1 + 0,45 Oh^{0,5})(1 + 0,4 T^{0,7})}{(1 + 0,865 We_g^{1,67})^{0,6}} \quad (4.2b)$$

na qual r_0 é o raio inicial do jato. As gotículas a serem criadas com a quebra primária do jato têm o raio estimado pela equação:

$$r_{new} = B_0 \Lambda_{KH} \quad (4.3)$$

na qual a constante B_0 foi retirada da proposição de Liu *et al.* [62], que depende de um número aleatório P^* que varia entre zero e a unidade.

$$B_0 = 0,3 + 0,6 P^* \quad (4.4)$$

A quebra baseada nas instabilidades de Kelvin-Helmholtz acontece continuamente, à medida que o jato penetra na fase gasosa, enquanto o raio da nova gota r_{new} for menor ou igual ao raio da gota geradora r_0 . A perda de massa pela gota-mãe é estimada em função do tempo característico de quebra do jato τ_{bu} :

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{r - r_{new}}{t_{bu}}, t_{bu} = 3,726 B_1 \frac{r}{\Lambda_{KH} \Omega_{KH}} \quad (4.5)$$

O valor 20 foi atribuído à constante B_I , seguindo as recomendações de Reitz [61]. O código computacional foi escrito de tal modo que a cada quebra do jato uma nova parcela é gerada, atribuindo-se a ela um acréscimo de velocidade no plano tangencial à velocidade relativa da parcela-mãe com direção aleatória e com módulo dado pela Equação 4.9. Deve-se chamar a atenção para o fato de que o mecanismo KH prevê uma distribuição artificialmente bimodal para os diâmetros das gotículas, na qual as novas gotículas possuem diâmetros muito inferiores aos da gota mãe.

Conforme as gotas que se desmembraram do núcleo líquido na quebra primária avançam na câmara de combustão, novos processos de quebra podem ocorrer devido a interações aerodinâmicas. Estes desmembramentos recebem o nome de quebra secundária. No presente trabalho, o modelo de Rayleigh–Taylor (RT) [63] é utilizado para prever um desmembramento catastrófico secundário das gotículas. Este modelo também se fundamenta em instabilidades nas superfícies das gotas causadas pelas forças de arrasto, que tem uma freqüência de crescimento mais rápida Ω_{RT} e comprimento de onda Λ_{RT} correspondente dados por [64]:

$$\Omega_{RT} = \sqrt{\frac{2}{3\sqrt{3}\sigma} \frac{[|\vec{a}|(\rho_l - \rho_g)]^{3/2}}{\rho_l + \rho_g}} \quad (4.6a)$$

$$\Lambda_{RT} = C_3 2\pi \sqrt{\frac{3\sigma}{|\vec{a}|(\rho_l - \rho_g)}} \quad (4.6b)$$

O fator C_3 é uma constante ajustável que teve seu valor igualado a 0,1 [65]. A desintegração é, então, induzida por uma desaceleração causada pelas forças de arrasto aerodinâmico a :

$$|\vec{a}| = \frac{3}{8} c_D \frac{\rho_g u_{rel}^2}{\rho_l r} \quad (4.7)$$

na qual c_D é o coeficiente de arrasto, u_{rel} a velocidade relativa entre a gota e o gás e r o raio da gota.

Essas instabilidades crescem até um certo tempo característico quando finalmente ocorre a desintegração da gota. O tempo característico para as instabilidades de RT é dado pelo inverso da frequência de crescimento ($t_{bu} = \Omega_{RT}^{-1}$). Ao tempo $t = t_{bu}$, a gota se desintegra em gotas menores com diâmetro estimado igual ao comprimento de onda λ_{RT} . Só é permitida a quebra de uma gota através das instabilidades de RT enquanto o λ_{RT} for menor que seu diâmetro [65].

Devido ao fato das instabilidades RT dependerem diretamente da velocidade relativa u_{rel} , vide Equações 4.6 e 4.7, seria natural que este mecanismo predominasse na região do núcleo intacto onde as maiores velocidades relativas do *spray* são registradas. Contudo, esta é a região de influência exclusiva da quebra primária, prevista pelo modelo KH, o que torna necessária a desabilitação da quebra catastrófica secundária pelo mecanismo RT nas proximidades do orifício injetor. Por este motivo, a atuação do mecanismo RT é restringida na região do núcleo intacto, sendo habilitada somente a partir de uma distância de penetração l_{bu} dada por:

$$l_{bu} = \frac{B_1}{8} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} d_{noz} \quad (4.8)$$

A partir de l_{bu} , a quebra simultânea pelos mecanismos RT e KH passa a ser considerada. Com a atuação do modelo RT, a distribuição bimodal prevista na quebra primária com o mecanismo KH passa a ser “diluída”, obtendo-se uma distribuição mais coerente com relação a dados experimentais para os diâmetros das gotículas de combustível.

Após cada desmembramento secundário ou primário, a componente perpendicular da velocidade das gotas foi determinada pela correlação sugerida por Reitz e Braco [66]:

$$v_{\perp} = \frac{\Omega \Lambda}{A} \quad (4.9)$$

com a constante A dada em função do diâmetro de orifício (d_{noz}) e do comprimento do canal do bico injetor (l_{noz}) [17]:

$$A = 3.0 + \frac{l_{noz}/d_{noz}}{3.6} \quad (4.10)$$

4.2 Modelos de ignição

Halstead *et al.* [67] desenvolveram um modelo de cinética de ignição conhecido como modelo de multi-passos Shell, que foi originalmente projetado para a descrição da auto-ignição de hidrocarbonetos em motores a gasolina. Posteriormente, este modelo também foi aplicado com sucesso para combustão em motores diesel [24]. O modelo Shell é baseado num esquema de oito reações de cadeia ramificada parâmetros cinéticos. As espécies envolvidas nas reações do modelo Shell adaptado aos hidrocarbonetos oxigenados são: RH , o combustível hidrocarboneto oxigenado de composição $C_nH_{2m}O_k$; O_2 , o oxigênio molecular; R^* , os radicais formados a partir da quebra da cadeia do combustível; B , o agente de ramificação; Q , as espécies intermediárias; P , os produtos (CO , CO_2 e H_2O). As reações em cada passo deste modelo são apresentadas na Tabela 4.1.

No esquema de reações, os radicais formados a partir da cadeia do combustível não são especificados individualmente, mas sim em termos da concentração total de radicais R^* . O ciclo de propagação de cadeia (reação 2) é o único passo que considera a liberação de energia química. As espécies intermediárias Q , formadas na reação 4, representam componentes oxigenados como os radicais aldeídos ($R-CHO$) e peróxido de alquila ($R-O_2$), sendo elementos importantes na produção do agente de ramificação B (reação 5), que por sua vez, induz a ignição. O agente de ramificação B representa radicais hidroperóxidos ($R-O_2H$) em baixas temperaturas e os peróxidos de hidrogênio (H_2O_2) em altas temperaturas.

Tabela 4.1. Mecanismo de reações para auto-ignição (modelo Shell)

Passo	Reações	Coefficientes
1	$RH + O_2 \rightarrow 2R^*$	k_q
2	$R^* \rightarrow R^* + P + Calor$	k_p
3	$R^* \rightarrow R^* + B$	f_1k_p
4	$R^* \rightarrow R^* + Q$	f_4k_p
5	$R^* + Q \rightarrow R^* + B$	f_2k_p
6	$B \rightarrow 2R^*$	k_b
7	$R^* \rightarrow Terminação$	f_3k_p
8	$2R^* \rightarrow Terminação$	k_t

O transporte das espécies químicas R^* , Q e B envolvidas no modelo Shell incorporado no software KIVA sob as mesmas regras dos demais gases do cilindro, utilizando-se os valores de massa molecular e entalpia sugeridos em [68]. As taxas de variação da concentração das espécies envolvidas são dadas pelas expressões 4.11 a 4.13, as quais contêm modificações sugeridas por Schapertons e Lee [69] e Hamosfakidis e Reitz [68] com relação ao mecanismo Shell original de Halstead *et al.* [67]:

$$\frac{d[R^*]}{dt} = 2(k_q[RH][O_2] + k_B[B] - k_t[R^*]^2) - f_3k_p[R^*] \quad (4.11)$$

$$\frac{d[B]}{dt} = f_1k_p[R^*] + f_2k_p[Q][R^*] - k_B[B] \quad (4.12)$$

$$\frac{d[Q]}{dt} = f_4k_p[R^*] - f_2k_p[Q][R^*] \quad (4.13)$$

Os coeficientes f_i ($i = 1, 2, 3$ e 4) são dados em função das concentrações do combustível e do oxigênio:

$$f_i = A_{f_i} \exp\left(\frac{-E_{f_i}}{RT}\right) [O_2]^{x_i} [RH]^{y_i} \quad (4.14)$$

Os parâmetros cinéticos k_i ($i = 1, 2, 3, q, b$ e t) são dados por uma expressão do tipo Arrhenius (Eq. 4.15), a exceção de k_p , que é dado pela Equação 4.16.

$$k_i = A_i \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right) \quad (4.15)$$

$$k_p = \left(\frac{1}{k_{p_1}[O_2]} + \frac{1}{k_{p_2}} + \frac{1}{k_{p_3}[RH]}\right)^{-1} \quad (4.16)$$

Os valores das constantes cinéticas das equações acima foram retirados da versão inicial do mecanismo Shell [67] para um combustível de 80 octanas, tendo-se alterado apenas os valores de E_{F4} . Para óleo diesel convencional adotou-se $E_{F4} = 37,5 \cdot 10^5$ cal/mol, enquanto, para a mistura B20, empregou-se $E_{F4} = 37,5 \cdot 10^5$ cal/mol.

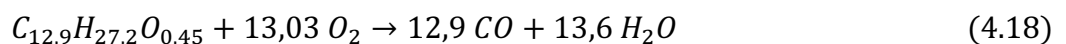
O consumo de combustível durante a ignição é modelado através de uma análise de liberação energia. Com uma estimativa da quantidade de energia química liberada na reação 2, faz-se a predição da massa de combustível que deve ser queimada em uma reação de combustão estequiométrica para se obter tal energia. Assim, atualizam-se as concentrações locais de combustível, oxigênio, água e gás carbônico. O critério de ignição adotado foi a ultrapassagem do limite de 1100 K para a temperatura. Deste modo, em células computacionais nas quais a temperaturas foi superior a este limite, desabilitou-se o modelo Shell e empregou-se o modelo de combustão descrito a seguir para se calcular a liberação de energia.

4.3 Modelos de combustão

Considerou-se que a carga do cilindro é composta por doze substâncias: combustível, O_2 , N_2 , CO_2 , H_2O , H , H_2 , O , N , OH , CO e NO . O consumo de combustível pela reação de queima é calculado através de um modelo de cinética global de dois passos. A reação de oxidação para o dodecano ($C_{12}H_{26}$) é dada por:



Para a mistura B20 ($C_{12,9}H_{27,2}O_{0,45}$) tem-se:



A segunda reação do modelo trata da oxidação do intermediário monóxido de carbono, sendo considerada igual para os dois combustíveis:



As taxas destas reações foram calculadas ponderando-se uma expressão do tipo de Arrhenius e o modelo de combustão turbulenta *eddy-breakup* (*ebu*). No início do processo, onde a maioria das espécies envolvidas são reagentes, a combustão é controlada pela cinética

química e prevalece o consumo de combustível através da taxa dada pela expressão de Arrhenius (\dot{w}_{cq}). Adotou-se a Equação 4.20 para a taxa referente à primeira reação do modelo de combustão (Eq. 4.17 e 4.18):

$$\dot{w}_{cq} = \frac{d[comb]}{dt} = -A \exp\left(-\frac{15098}{T}\right) [comb]^{0,25}[O_2]^{1,5} \quad (4.20)$$

A Equação 4.21 representa a taxa de consumo do monóxido de carbono (CO) na segunda reação do modelo (Eq. 4.19):

$$\dot{w}_{cq} = \frac{d[CO]}{dt} = -A \exp\left(-\frac{20138}{T}\right) [CO][O_2]^{0,25}[H_2O]^{0,5} \quad (4.21)$$

O fator pré-exponencial A é dado por $1,18 \cdot 10^{11}$ para as reações de consumo dos dois combustíveis e $1,088 \cdot 10^{10}$ para a reação de consumo do monóxido de carbono.

No final do processo, os produtos compõem a maior parte das espécies envolvidas, fazendo com que a combustão seja controlada pelo transporte turbulento dos reagentes, prevalecendo o consumo de combustível através da taxa dada pelo modelo *eddy-breakup* (\dot{w}_{ebu}). A taxa dada pela Equação 4.22 é referente à primeira reação do modelo de combustão para os dois combustíveis (Eq. 4.17 e 4.18) e a Equação 4.23 é referente à segunda reação do modelo (Eq. 4.19).

$$\dot{w}_{ebu} = \frac{d[comb]}{dt} = \frac{A \cdot \min\left(Y_{comb}; \frac{Y_{O_2}}{af_{st}}\right)}{\tau} \quad (4.22)$$

$$\dot{w}_{ebu} = \frac{d[CO]}{dt} = \frac{A \cdot \min\left(Y_{CO}; \frac{Y_{O_2}}{(af_{st})_{CO}}\right)}{\tau} \quad (4.23)$$

nas quais Y_i representa a fração mássica da espécie i e τ é a escala de tempo de turbulência dada por:

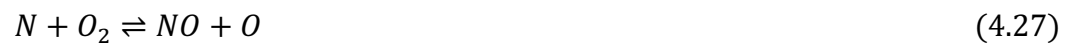
$$\tau = 0,005 \frac{k}{\varepsilon} \quad (4.24)$$

A taxa de consumo de combustível utilizada pelo modelo *ebu* leva em consideração a menor taxa entre o combustível e o oxigênio para limitar as reações de acordo com a escassez de algum desses reagentes. Assim, a taxa de consumo total das reações químicas do modelo de combustão é:

$$\dot{w} = (1 - Z)\dot{w}_{cq} + Z\dot{w}_{ebu} \quad (4.25)$$

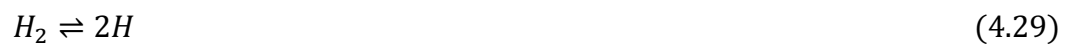
na qual Z é um fator de progressão da reação de combustão [70]. Os valores das constantes utilizadas nos modelos de combustão foram obtidos através do ajuste entre as curvas preditas pelo modelo multidimensional para a pressão no cilindro e as curvas obtidas experimentalmente.

A formação de óxidos de nitrogênio (NO_x) é considerada através do mecanismo estendido de Zeldovich, o qual é composto das seguintes reações:



Estas são as reações de formação térmica de NO_x , as quais são fortemente dependentes da temperatura, tornando-se significativas para valores superiores a 2000 K.

Foi considerada a hipótese de equilíbrio parcial para as espécies: O_2 , N_2 , H_2O , H , H_2 , O , N e OH , por meio das reações de equilíbrio químico:



5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 Avaliação de consumo/desempenho

As condições de operação do motor nas quais se obtiveram estes dados experimentais e se realizaram as simulações foram de 2100 rotações por minuto e plena carga. Operando com óleo diesel o motor desenvolveu 51,32 kW de potência e apresentou um consumo específico de 288,8 g/kW h. Já com a mistura contendo 20% de biodiesel de mamona, observou-se uma potência de 53,7 kW e um consumo de 268,9 g/kW h. Nas condições estudadas, portanto, a utilização de mistura B20 acabou favorecendo o desempenho do motor. Obviamente, este tipo de resultado apresenta forte dependência quanto ao regime operacional e características do motor utilizado, não podendo simplesmente ser estendido para motores com outra tecnologia de combustão ou para outros regimes de funcionamento. Bueno *et al.* [1] obtiveram resultados semelhantes com este mesmo motor operando em 2000 rotações por minuto e plena carga com mistura B20 produzida a partir do éster etílico do óleo de soja.

5.2 Geração da malha computacional e condições iniciais de simulação

A malha computacional adotada é apresentada na Figura 5.1. A silhueta do pistão foi adquirida empregando-se um molde de silicone, de modo que todos os detalhes da geometria do pistão e a própria razão de compressão geométrica do motor se replicaram na malha computacional. Os cinco orifícios do injetor de combustível são igualmente espaçados e foram representados individualmente nas simulações. A geração de malha foi efetuada com o pré-processador padrão do programa KIVA.

O nível de dependência dos resultados numéricos quanto ao refinamento da malha foi analisado comparando-se resultados simulados de emissões brutas (*engine out*) de CO e NO com dados experimentais. A formação destes poluentes tem forte dependência espacial e

deve apontar, com precisão, a qualidade com que se representaram os processos de formação de mistura e combustão. Grades cujas arestas médias das células computacionais medem 3,5 mm, 3,0 mm, 2,5 mm, 2,0 mm e 1,5 mm foram consideradas, conforme se observa nas Figuras 5.2 (a) e (b). Nota-se, nesta figura, a aproximação dos resultados numéricos com relação aos valores obtidos experimentalmente para a emissão de NO em malhas computacionais a partir de 40.000 volumes e para o CO a partir de 80.000 volumes. Refinamentos superiores à 1,5 mm, aresta correspondente a 80.000 volumes, não foram possíveis devido à violação da hipótese de que as gotículas constituam uma fase esparsa (Ver Seção 2.1.4). Com base na tendência apontada pelas emissões de monóxido de carbono, adotou-se neste trabalho a malha computacional com aresta média de 1,5 mm. De fato, empregaram-se dimensões equivalentes à versão de maior refinamento de malha utilizada por Shuai *et al.* [71] para a simulação de um motor diesel similar ao estudado.

Os cálculos foram iniciados a partir do fechamento das duas válvulas de admissão, que ocorre a $148,5^\circ$ antes do ponto morto superior, considerando-se ar uniformemente distribuído, como o conteúdo do cilindro, cuja pressão e temperatura foram adquiridas experimentalmente. O turbilhonamento na câmara (*swirl*) foi inicializado com um perfil de velocidades dado por uma função de Bessel de acordo com os procedimentos sugeridos por Wahiduzzaman e Ferguson [72]. Para a inicialização do escoamento turbulento, utilizou-se um valor de 1% da velocidade média do pistão para as flutuações turbulentas de velocidade, e um comprimento de escala integral igual a 10% do diâmetro do pistão.

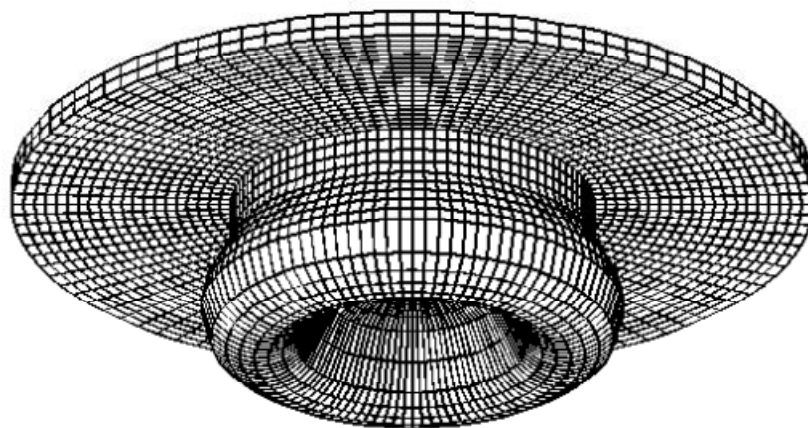
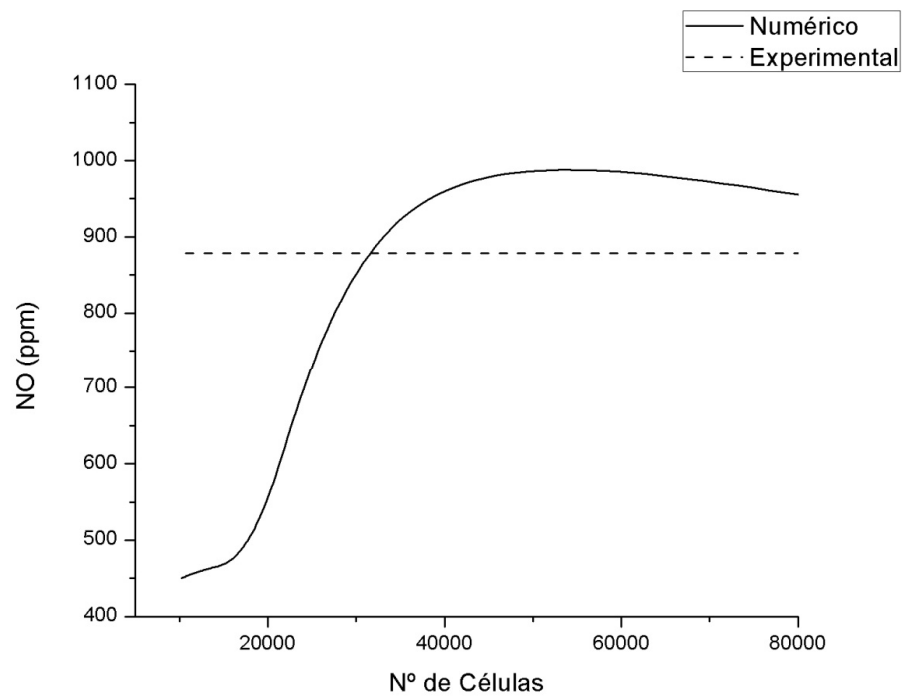
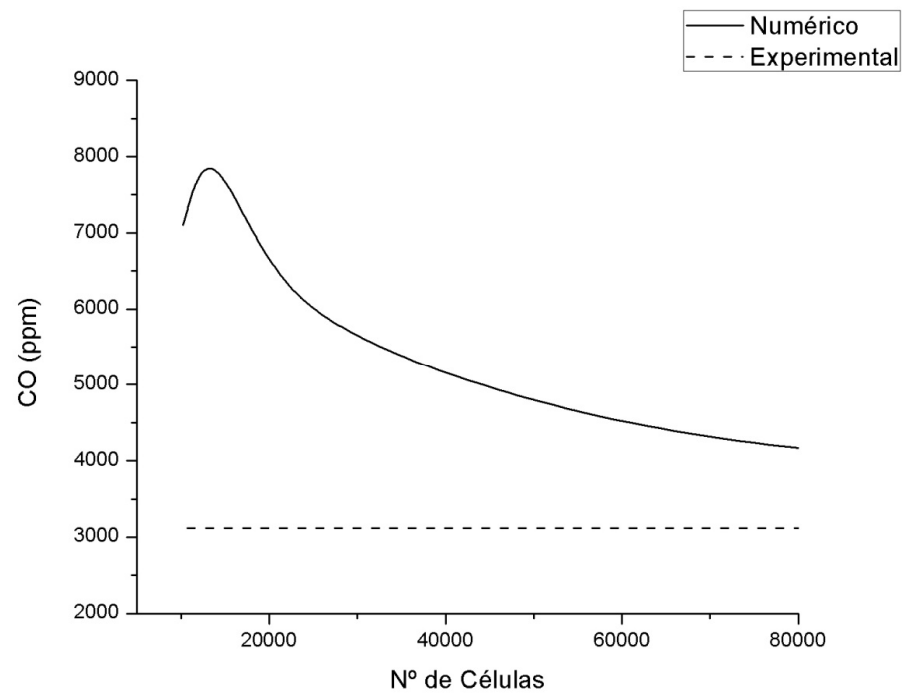


Figura 5.1 Malha computacional da câmara de combustão do pistão



(a)



(b)

Figura 5.2. Avaliação da dependência dos resultados quanto à malha computacional através da emissão de (a) óxido de nitrogênio e (b) monóxido de carbono.

5.3 Resultados das simulações – influência da mistura B20 na formação do jato

Devido às alterações introduzidas na viscosidade do combustível, a adição de biodiesel afeta a lubrificação e o retorno (blowby) no elemento da bomba [4]. Para o motor utilizado na dissertação, a combinação destes efeitos causou uma redução na massa de combustível injetada por ciclo para a mistura B20 (28,7 mg/cilindro) com relação ao óleo diesel (29,5 mg/cilindro). Uma antecipação de $0,5^\circ$ no ângulo de manivela de início da injeção foi observada com a mistura B20. Isto pode ser atribuído à taxa de vaporização mais do biodiesel de mamona devido à alta viscosidade [3].

Como o biodiesel (um combustível oxigenado) também possui uma relação estequiométrica ar-combustível inferior à do diesel, observou-se que a mistura B20 causou um empobrecimento de 7,6% na relação de equivalência global. Espera-se que a viscosidade elevada do biodiesel de mamona também afete a dinâmica do jato, pois combustíveis mais viscosos aumentam a sua quantidade de movimento, penetração e velocidade [5, 7, 73, 74]. Portanto, devem-se obter reduções importantes nos valores locais da relação de equivalência combustível-ar das zonas ricas de combustível do *spray* com a mistura B20, de acordo com os resultados apresentados por Rakopoulos *et al.* [75]. Este aumento na quantidade de movimento promovido pelo biodiesel também intensifica a energia cinética turbulenta disponível no jato, o que causa um efeito positivo significativo na taxa de queima durante a combustão controlada pela mistura [76].

Diagramas de liberação de energia e de pressão no cilindro do motor previstos nas simulações são comparados a dados experimentais nas Figuras 5.3 e 5.4, tendo-se obtido um grau de concordância razoável. Para os combustíveis estudados, as modificações introduzidas no jato de combustível com a adição de biodiesel aceleraram os processos de preparação e queima, antecipando o ângulo necessário para a queima de 90% do combustível injetado em $9,5^\circ$ para a mistura B20 com relação ao óleo diesel mineral. Estes resultados estão em acordo com os obtidos por Tormos *et al.* [77], que explicaram a queima acelerada do biodiesel através de uma analogia entre o *spray* diesel e um jato gasoso, concluindo que o biodiesel apresenta um tempo característico inferior ao do óleo diesel durante a combustão controlada pela mistura.

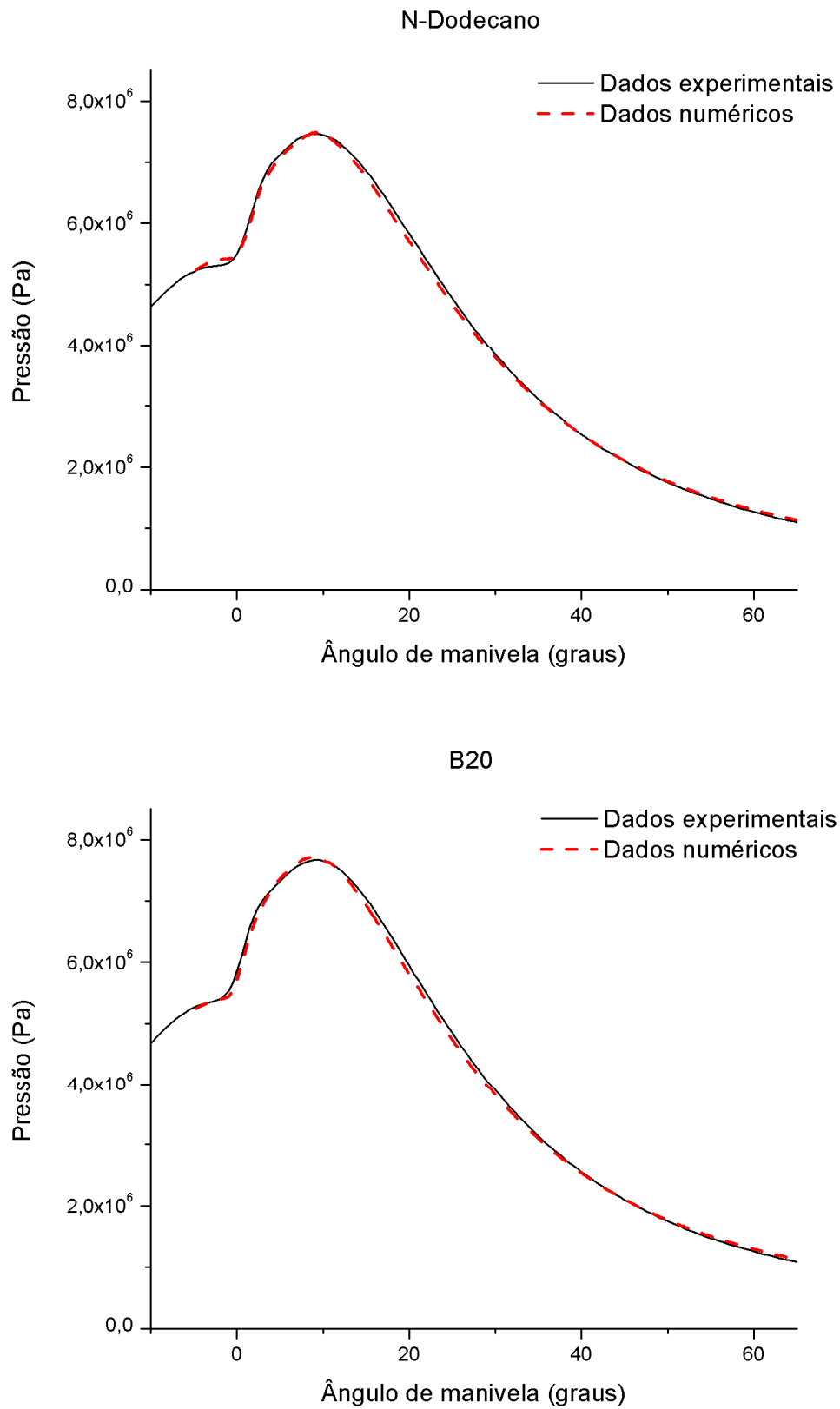


Figura 5.3. Curvas de pressão no cilindro (numéricas e experimentais)

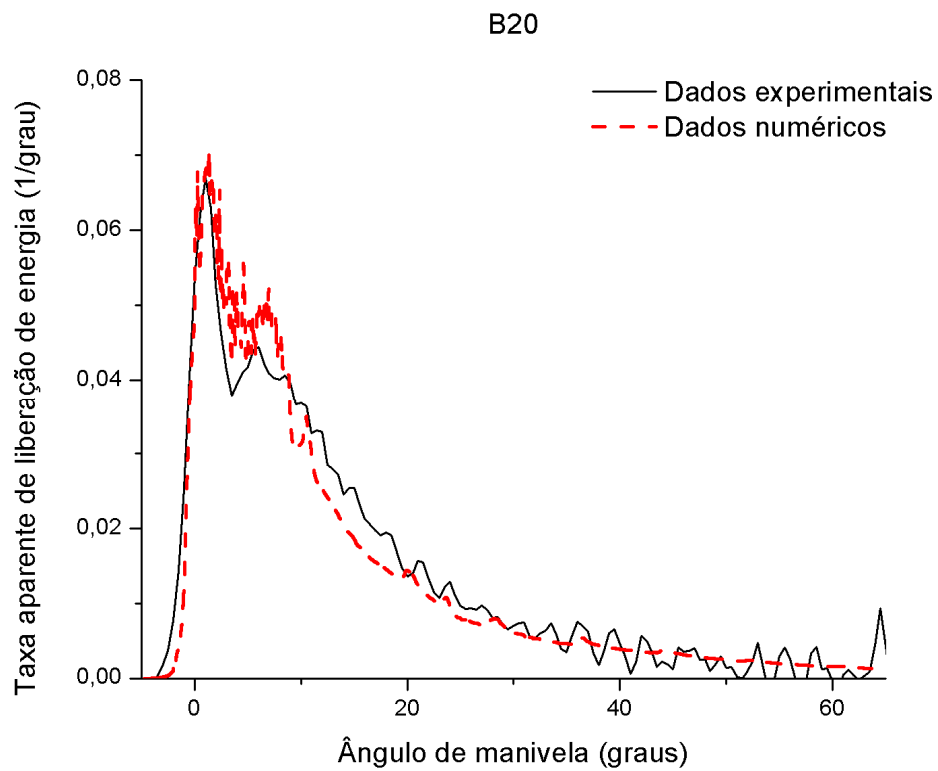
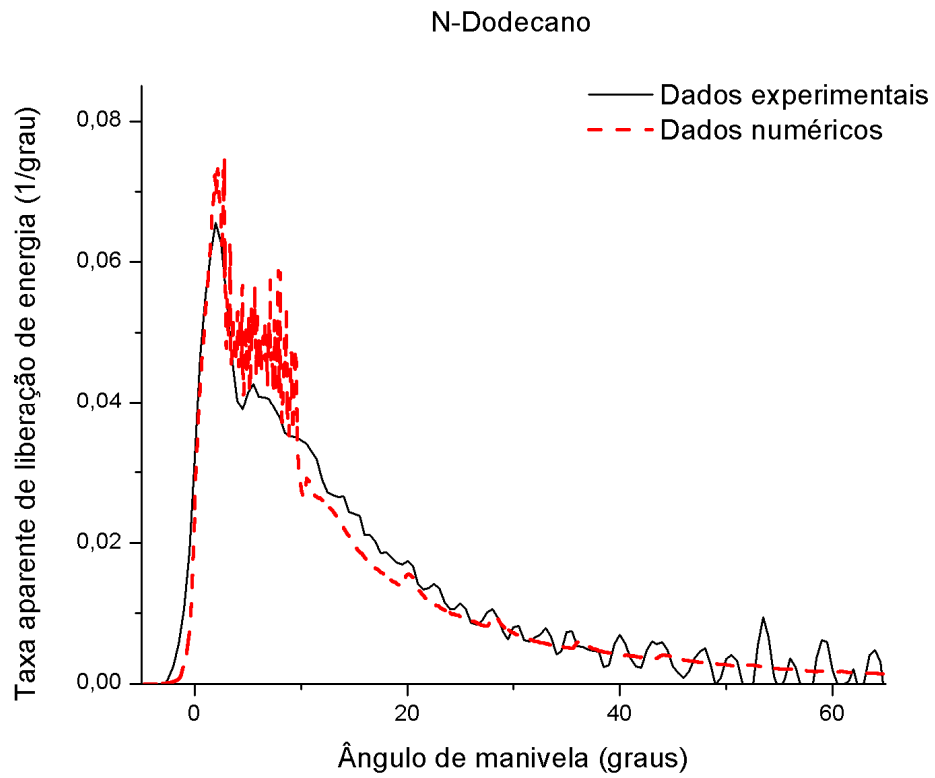


Figura 5.4. Curvas de liberação de energia (numéricas e experimentais)

A Figura 5.5 apresenta os valores dos raios e temperaturas das parcelas de óleo diesel e B20 no ponto morto superior do pistão. Devido à maior velocidade de injeção obtida ao se adicionar o biodiesel, que possui maior viscosidade e densidade, observa-se que as gotículas da mistura B20 tiveram seu raio reduzido mais rapidamente com relação ao óleo diesel, vaporizando-se em uma distribuição espacial mais compacta e sob menor influência do escoamento de turbilhonamento (*swirl*). Contudo, não se pode afirmar aqui que a vaporização do combustível tenha sido alterada significativamente mediante a adoção da mistura B20.

A expectativa quanto à maior velocidade de injeção para a mistura B20 é confirmada na Figura 5.6, onde se observam as distâncias de penetração do combustível vaporizado na câmara de combustão também para o ponto morto superior. Este acréscimo na quantidade de movimento do jato de combustível e na distância de penetração está em acordo com dados reportados para outros tipos de biodiesel [73, 74]. Pode-se notar que a ignição ocorreu antes para a mistura B20 com relação ao óleo diesel. Além dos fatores de aceleração do processo de formação de mistura citados no parágrafo anterior, aspectos químicos como o empobrecimento da mistura (cinética de pré-ignição) também podem ter acarretado este comportamento. De fato, nota-se que o alto número de cetano do biodiesel teve uma influência preponderante neste quesito.

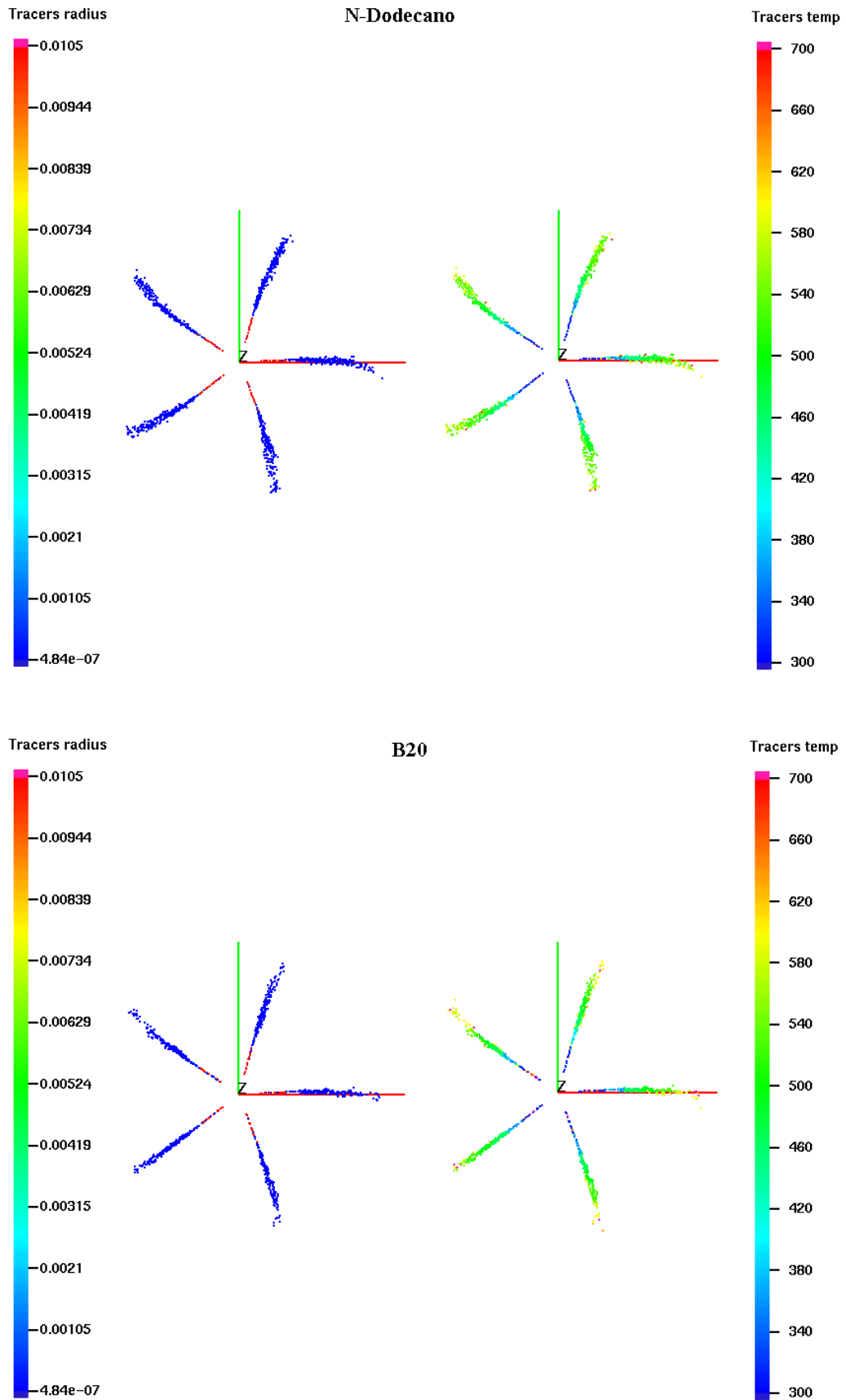


Figura 5.5. Parcelas de combustível (temperaturas apresentadas na escala Kelvin)

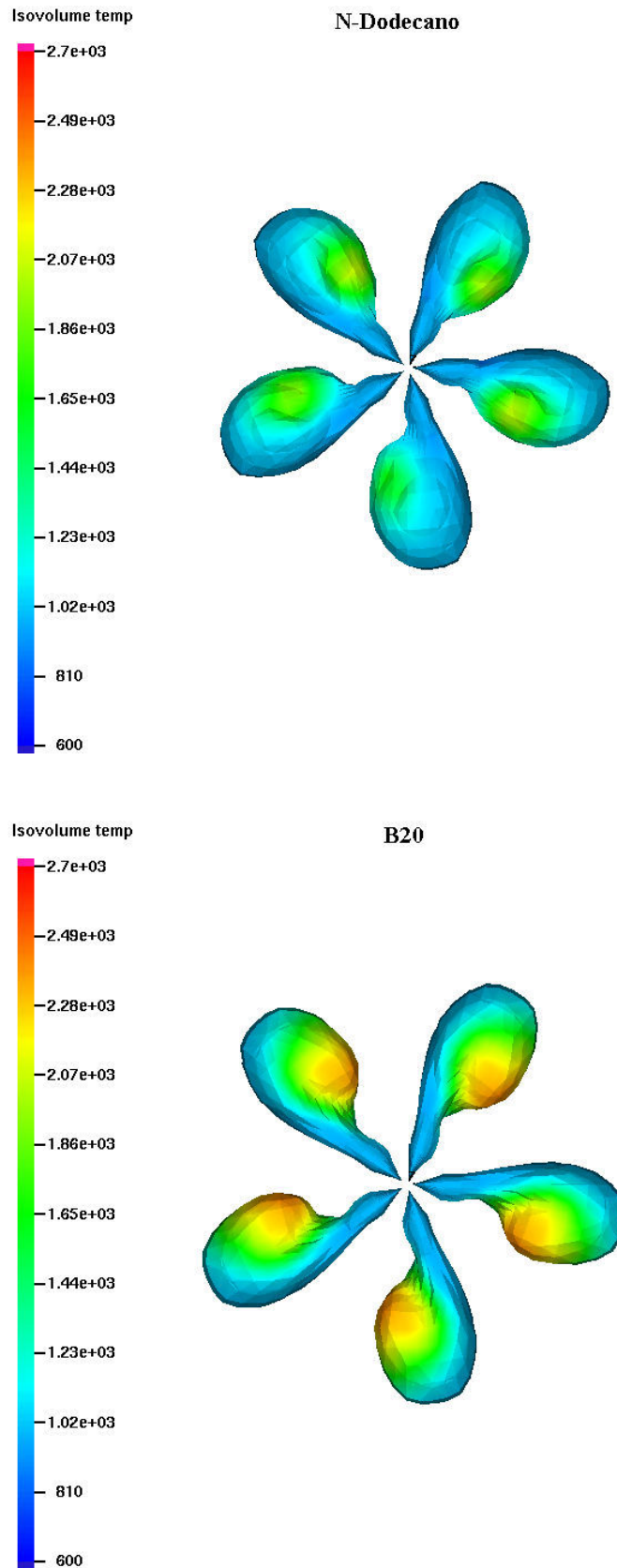


Figura 5.6. Contornos do jato de combustível no PMS (temperaturas apresentadas na escala Kelvin)

5.4 Avaliação da emissão de poluentes

A antecipação da ignição, a redução nos valores da relação de equivalência combustível/ar nas regiões mais ricas e o aumento na energia cinética turbulenta na periferia do jato tiveram um efeito positivo significativo nas taxas de queima. Contudo, estes fatores também intensificam a formação de óxidos de nitrogênio (NO_x). De acordo com Dec [14], a produção de NO_x concentra-se na periferia da chama difusiva formada em motores diesel, sendo favorecida por relações de equivalência ligeiramente pobres e altas temperaturas. Na Figura 5.7 são apresentados os valores da temperatura no jato de combustível a $8,5^\circ$ após a passagem do pistão pelo ponto morto superior, onde se observa que a utilização de mistura B20 acabou elevando a temperatura na periferia do jato e, ao mesmo tempo, a área da superfície exposta a altas temperaturas. As concentrações de óxido de nitrogênio ao longo do jato de combustível podem ser observadas na Figura 5.8, confirmando a expectativa de maiores concentrações com o uso de mistura B20. Estes resultados estão em acordo com as tendências de maiores temperaturas e maior penetração do jato de combustível, reportadas por Kong e Reitz [78] para o éster metílico de óleo de soja. Contudo, os efeitos da adição de biodiesel de mamona ao óleo diesel se mostraram ainda mais significativos que os obtidos com biodiesel de soja, causando modificações agudas na estrutura do jato de combustível. De fato, os valores previstos pelas simulações para as emissões de NO_x foram de 979,01 ppm para o óleo diesel e 1162,26 ppm para a mistura B20, indicando um acréscimo de 18% nas emissões deste poluente com a adição do biodiesel de mamona. Este valor é significativamente superior aos 6% a 8% de acréscimo na emissão de óxidos de nitrogênio observados para a aplicação da mistura B20 proveniente de outros óleos vegetais [8]. Pode-se atribuir este comportamento à maior dissimilaridade entre as propriedades do biodiesel proveniente da mamona e as do óleo diesel, notadamente a viscosidade e a temperatura crítica.

Já para o monóxido de carbono (CO), registraram-se nas simulações 3880,19 ppm para o óleo diesel e 2924,15 ppm para a mistura B20, ou seja, obteve-se uma redução de 24,64% nas emissões deste poluente. Este resultado é explicado pelo empobrecimento causado pelo biodiesel nas regiões de queima rica do jato de combustível (Fig. 5.9). É

interessante ressaltar ainda, que as reduções obtidas para o CO devem ser reproduzidas para as emissões de material particulado, outro poluente favorecido por regiões de queima rica [8].

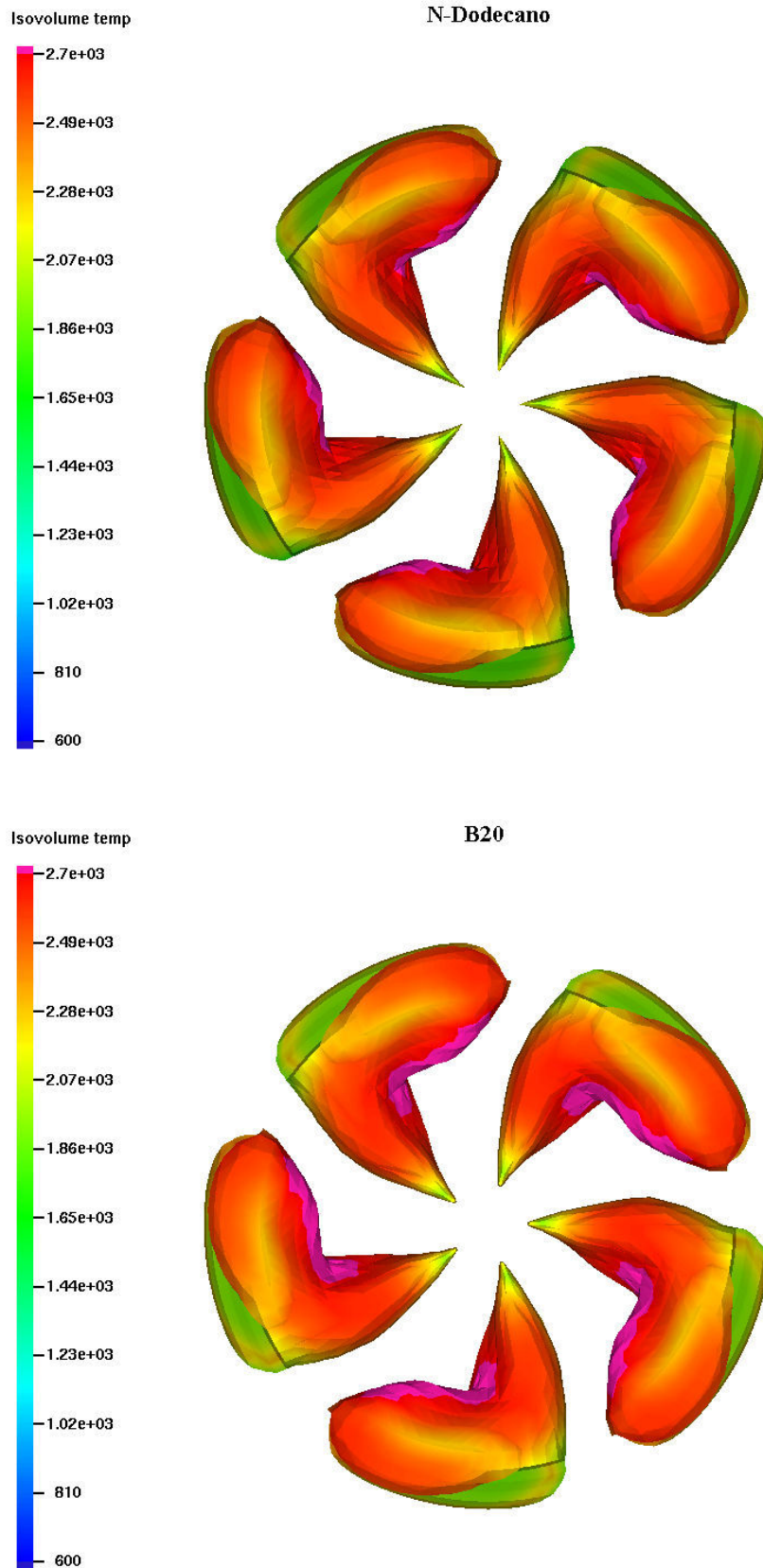


Figura 5.7. Contornos do jato de combustível a 8,5° do PMS (temperaturas apresentadas na escala Kelvin)

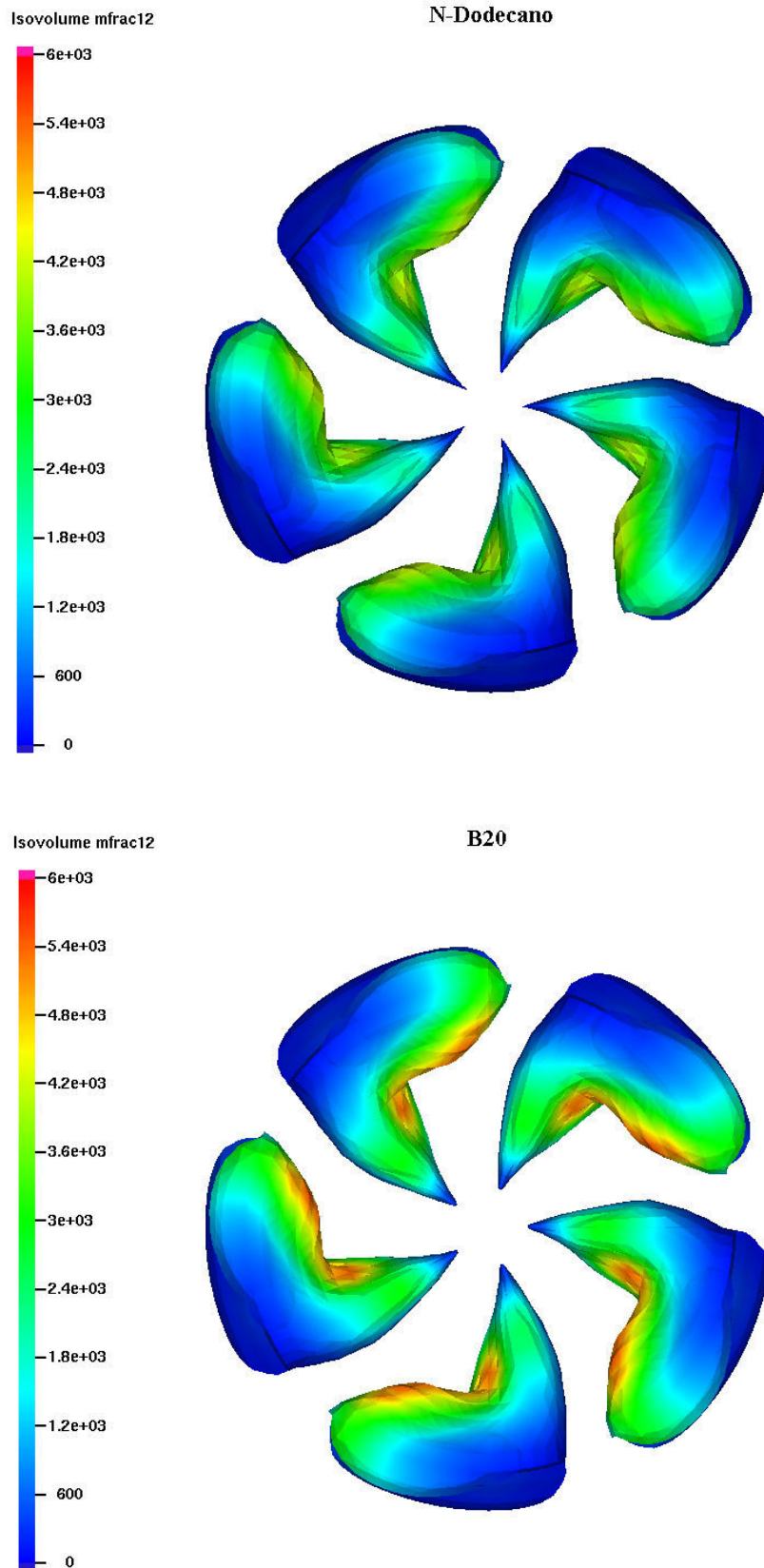


Figura 5.8. Contornos do jato de combustível a 8,5° do PMS (ppm NO)

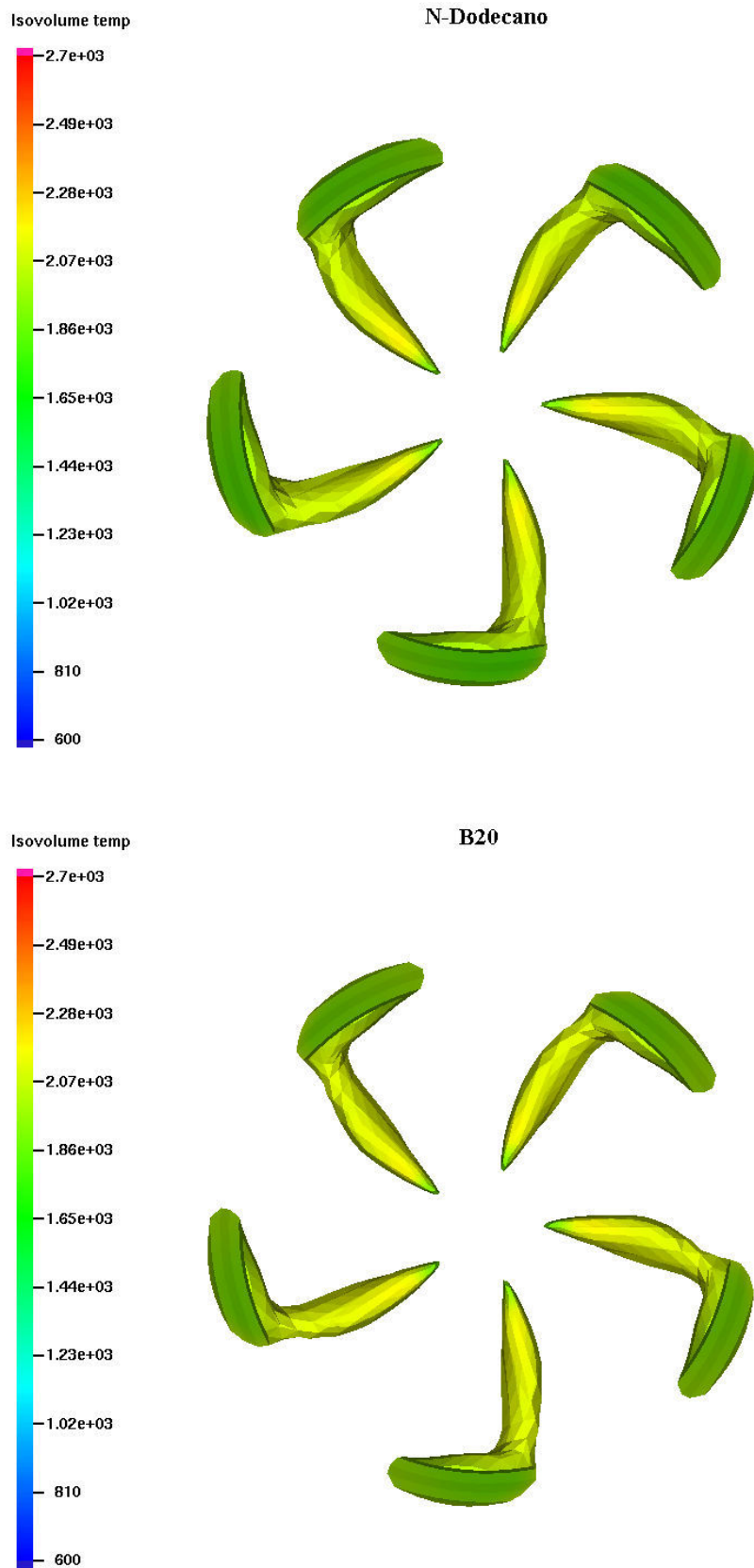


Figura 5.9. Contornos do trecho do jato de combustível com relação de equivalência combustível/ar superior a 2, com o pistão a 8,5° do PMS

6 CONCLUSÕES

Simulações multidimensionais foram conduzidas para um motor diesel rápido turboalimentado utilizando-se o software KIVA 3 VR-2 e modelos matemáticos para a quebra do jato, para a cinética química de ignição e combustão turbulenta. As simulações foram validadas empregando-se dados experimentais de pressão no cilindro do motor e taxas aparentes de liberação de energia. O desempenho do motor operando com mistura B20 foi superior ao obtido com diesel mineral, tendo-se constatado um ganho de 4,8% na potência de frenagem e uma redução de 6,9% no consumo específico.

A alta viscosidade e a maior densidade do biodiesel de mamona fizeram com que o jato de combustível alcançasse maiores distâncias de penetração com o uso da mistura B20 com relação ao óleo diesel. O maior número de cetano da mistura B20 também fez com que a queima antecipada, em comparação ao que foi observado quando se utiliza óleo diesel puro. Além disto, o uso do biodiesel de mamona como substituto parcial para o óleo diesel convencional acabou aumentando a área externa do jato de combustível exposta a altas temperaturas e, portanto, favorecendo a formação de óxido de nitrogênio. Observou-se um aumento de 18% na emissão de óxidos de nitrogênio (NO_x) com a adoção da mistura B20. Em contrapartida, as taxas de emissão de monóxido de carbono (CO), um poluente favorecido em regiões de mistura rica, se mostraram 24,64% menores para a mistura contendo o biocombustível.

REFERÊNCIAS

- [1] BUENO, A., VELÁSQUEZ, J., MILANEZ, L. F., *Effect of Soybean Oil Ethyl Ester/Diesel Fuel Blend on Engine Efficiency*, Special Issue on Combustion, Fuels and Emission Control in Internal Combustion Engines, International Journal of Vehicle Design, Vol. 50, pp. 229-257, 2009.
- [2] AGARWAL, A. K., DAS, L. M., *Biodiesel Development and Characterization for Use as a Fuel in Compression Ignition Engines*, Transactions of the ASME, Vol. 123, pp. 440-447, 2001.
- [3] ALI, Y., HANNA, M. A., LEVITICUS, L. I., *Emissions and Power Characteristics of Diesel Engines on Methyl Soyate and Diesel Fuel Blends*, Bioresource Technology, Vol. 52, pp. 185-195, 1995.
- [4] RAKOPOULOS, C. D., RAKOPOULOS, D. C., HOUNTALAS, D. T., GIAKOUMIS, E. G., ANDRITSAKIS, E. C., *Performance and Emissions of Bus Engine Using Blends of Diesel Fuel with Bio-Diesel of Sunflower or Cottonseed Oils Derived from Greek Feedstock*, Fuel, Vol. 87, pp. 147-157, 2007.
- [5] CHANG, C., FARRELL, P., *A Study on the Effects of Fuel Viscosity and Nozzle Geometry on High Injection Pressure Diesel Spray Characteristics*, SAE Paper 970353, 1997.
- [6] CHOI, C. Y., REITZ, R. D., *A Numerical Analysis of the Emissions Characteristics of Biodiesel Blended Fuels*, Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, Vol. 121, pp. 31-40, 1999.
- [7] CHOI, C. Y., REITZ, R. D., *An Experimental Study on the Effects of Oxygenate Fuel Blends and Multiple Injection Strategies on DI Diesel Engine Emissions*, Fuel, Vol. 78, pp. 1303-1327, 1999.

- [8] UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (EPA), *A Comprehensive Analysis of Biodiesel Impacts on Exhaust Emissions*, Draft Technical, Report EPA420-P-02-001, 2002.
- [9] RAKOPOULOS, C. D., ANTONOPOULOS, K. A., *Multi-Zone Modeling of Diesel Engine Fuel Spray Development with Vegetable Oil, Bio-Diesel or Diesel Fuels*, Energy Conversion and Management, Vol. 47, pp. 1550-1573, 2006.
- [10] AMSDEN, A. A., O'ROURKE, P. J., BUTLER, T. D., *KIVA- A Comprehensive Model for 2D and 3D Engine Simulations*, SAE Paper 850554, 1985.
- [11] AMSDEN, A. A., BUTLER, T. D., O'ROURKE, P. J., *The KIVA II Computer Program for Transient Multidimensional Chemically Reactive Flows with Sprays*, SAE Paper 872072, 1987.
- [12] AMSDEN, A. A., *KIVA III: A KIVA Program with Block Structured Mesh for Complex Geometries*, Los Alamos, report LA-12503-MS, 1993.
- [13] REITZ, R. D., RUTLAND, C. J., *Development and Testing of Diesel Engine CFD Models*, Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 21, pp. 173-196, 1995.
- [14] DEC, J. E., *A Conceptual Model of DI Diesel Combustion Based on Laser-Sheet Imaging*, SAE Paper 970873, 1997.
- [15] SINGH, S., MUSCULUS, M. P. B., REITZ, R. D., *Mixing and Flame Structures Inferred from OH-PLIF for Conventional and Low-Temperature Diesel Engine Combustion*, Combustion and Flame, Vol. 156, pp. 1898-1908, 2009.
- [16] O'ROURKE, P. J., *Collective Drop Effects on Vaporizing Liquids Sprays*, Tese (Ph.D.), Princeton University, 1981.

- [17] REITZ, R. D., *Computer Modeling of Sprays*, Spray Technology Short Course, Pittsburgh, 1994.
- [18] WILLIAMS, F. A., *Combustion Theory*, 2ed., Menlo Park: Benjamin/Cummings, 1985.
- [19] GUPTA, H. C., BRACCO, F. V., *Numerical Computations of Two-Dimensional Unsteady Sprays for Application to Engines*, AIAA Journal, Vol. 16, pp. 1053-1061, 1978.
- [20] HEYWOOD, J. B., *Internal Combustion Engine Fundamentals*, New York: McGraw-Hill, 1988.
- [21] DUKOWICZ, J. K., *A Particle-Fluid Numerical Model for Liquids Sprays*, J. Comp. Phys, Vol. 35, pp. 229-253, 1980.
- [22] O'ROURKE, P. J., BRACCO, F. V., *Modeling Drop Interactions in Thick Sprays and a Comparison with Experiments*, in: Stratified Charge Automotive Engines, I. Mech. E. Conference Publications, Vol. 9, pp. 101-116, 1980.
- [23] LEFEBVRE, A. H., *Atomization and Sprays*, Hemisphere Publishing Corp., New York, 1989.
- [24] KONG, S. C., REITZ, R. D., *Multidimensional Modeling of Diesel Ignition and Combustion Using a Multistep Kinetics Model*, Paper 93-ICE-22, ASME Transactions, Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, Vol. 115, No. 4, pp. 781-789, 1993.
- [25] homepages.cae.wisc.edu/~hessel/faqs/inGeneralWhatDoPhasesABCdoInKiva/inGeneralWhatDoPhasesABCdoInKiva.htm
- [26] RASSWEILER, G. M., WITHROW, L., *Motion Pictures of Engine Flames Correlated with Pressure Cards*, SAE Transactions, Vol. 38, pp. 185-204, 1938.

- [27] AUSTEN, A. E. W., LYN, W. T., *Relation between Fuel Injection and Heat Release in a Direct-Injection Engine and the Nature of the Combustion Processes*, Proc. Instn Mech. Engrs, N° 1, pp. 47-62, 1960-1961.
- [28] LYN, W. T., *Study of Burning Rate and Nature of Combustion in Diesel Engines*, *Proceedings of Ninth International Symposium on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 1069-1082, 1962.
- [29] WOSCHNI, G., *Computer Programs to Determine the Relationship between Pressure, Flow, Heat Release and Thermal Load in Diesel Engines*, SAE Paper 650450, 1965.
- [30] KRIEGER, R. B., BORMAN, G. L., *The Computation of Apparent Heat Release for Internal Combustion Engines*, ASME paper 66-WA/DGP-4, 1966.
- [31] GATOWSKI, J. A., BALLEES, E. N., CHUN, K. N., NELSON, F. E., EKCHIAN, J. A., HEYWOOD, J. B., *Heat Release Analysis of Engine Pressure Data*, SAE Paper 841359, 1984.
- [32] BUENO, A. V., VELÁSQUEZ, J., MILANEZ, L. F., *Heat Release and Engine Performance Effects of Soybean Oil Ethyl Ester Blending into Diesel Fuel*, Energy (Oxford), doi:10.1016/j.energy.2010.07.030, 2011.
- [33] ANNAND, W. J. D., MA, T. H., *Instantaneous Heat Transfer Rates to the Cylinder Head Surface of a Small Compression-Ignition Engine*, Proc. Inst. Mech. Engrs., Vol. 185, pp. 976-987, 1970-1971.
- [34] OLIKARA, C., BORMAN, G. L., *A Computer Program for Calculating Properties of Equilibrium Combustion Products with Some Applications to I.C. Engines*, SAE Paper 750468, 1975.

- [35] BUENO, A. V., VELÁSQUEZ J. A. , MILANEZ, L. F., *A New Engine Indicating Measurement Procedure for Combustion Heat Release Analysis*, Applied Thermal Engineering, Vol. 29, pp. 1657–1675, 2009.
- [36] ALLEN, C. A. W., WATTS, K. C., ACKMAN, R., *Predicting the Surface Tension of Biodiesel Fuels from their Fatty Acid Composition*, Journal of the American Oil Chemists' Society, Vol. 76, pp. 317-323, 1999.
- [37] ALLEN, C. A. W., WATTS, K. C., ACKMAN, R. G., PEGG, M. J., *Predicting the Viscosity of Biodiesel Fuels from their Fatty Acid Ester Composition*, Fuel, Vol. 78, pp. 1319-1326, 1999.
- [38] YUAN, W., HANSEN, A. C., ZHANG, Q., *Predicting the Physical Properties of Biodiesel for Combustion Modeling*, Transactions of the ASAE, Vol. 46, 1487-1493, 2003.
- [39] KOUTROUBAS, S. D., PAPAKOSTA, D. K., DOITSINIS, A., *Adaptation and Yielding Ability of Castor Plant (*Ricinus communis L.*) Genotypes in a Mediterranean Climate*, European Journal of Agronomy, Vol. 11, p. 227-237, 1999.
- [40] MARRERO-MOREJÓN, J., PARDILLO-FONTDEVILA, E., *Estimation of Pure Compound Properties Using Group-Interaction Contributions*, AIChE Journal, Vol. 45, pp. 615-621, 1999.
- [41] KLINCEWICZ, K. M., REID, R. C., *Estimation of Critical Properties with Group-Contribution Methods*, AIChE Journal, Vol. 30, pp. 137-142, 1984.
- [42] LYDERSEN, A. L., *Estimation of Critical Properties of Organic Compounds*, Madison: Univ. Wisconsin Coll. Eng., Eng. Exp. Stn. rept. 3, 1955.
- [43] CONSTANTINOU, L., GANI, R., *New Group Contribution Method for Estimating Properties of Pure Compounds*, AIChE Journal, Vol. 40, pp. 1697-1710, 1994.

- [44] POLING, B. E., PRAUSNITZ, J. M., O'CONNELL, J. P., *The Properties of Gases and Liquids*, 5ed., New York: McGraw Hill, 2001.
- [45] NANNOOLAL, Y., RAREY, J., RAMJUGERNATH, D., CORDES, W., *Estimation of Pure Component Properties. Part 1: Estimation of the Normal Boiling Point of Non-Electrolyte Organic Compounds via Group Contributions and Group Interactions*, Fluid Phase Equilibria, Vol. 226, pp. 45-63 2004.
- [46] YUAN, W., HANSEN, A. C., ZHAN, Q., *Vapor Pressure and Normal Boiling Point Predictions for Pure Methyl Esters and Biodiesel Fuels*, Fuel, Vol. 84, pp. 943-950, 2005.
- [47] BARONCINI, C., FILIPPO, P., LATINI, G., PACETTI, M., *Organic Liquid Thermal Conductivity: A Prediction Method in the Reduced Temperature Range 0.3 to 0.8*, Int. J. of Thermophysics, Vol. 2, N° 1, 1981.
- [48] ANTOINE, C., *C.R.*, 107: 681, 836, 1888. Citado a partir de “*The Properties of Gases and Liquids*” [44].
- [49] NDIAYE, P. M., TAVARES, F. W., DALMOLIN, I., DARIVA, C., OLIVEIRA, D., OLIVEIRA, J. V., *Vapor Pressure Data of Soybean Oil, Castor Oil, and Their Fatty Acid Ethyl Ester Derivatives*, J. Chem. Eng., 2005.
- [50] GIACALONE, A., *Gazz. Chim. Ital.*, 81: 180, 1951. Citado a partir de “*The Properties of Gases and Liquids*” [44].
- [51] MAJER, V., SVOBODA, V., PICK, J., *Heats of Vaporization of Fluids*, Studies in Modern Thermodynamics 9, Elsevier, 1989.
- [52] FISHTINE, S. H., *Ind. Eng. Chem.*, 55(4): 20, 55(5): 49, 55(6): 47(1963); *Hydrocarbon Process.Pet. Refiner*, 42(10): 143, 1963. Citado a partir de “*The Properties of Gases and Liquids*” [44].

- [53] KLEIN, V. A., *Chem. Eng. Prog.*, 45: 675, 1949. Citado a partir de “*The Properties of Gases and Liquids*” [44].
- [54] RIEDEL, L., *Chem. Ing. Tech.*, 26: 679, 1954. Citado a partir de “*The Properties of Gases and Liquids*” [44].
- [55] THEK, R. E., STIEL, L. I., *AIChE J.*, 12: 599 (1966), 13: 626, 1967. Citado a partir de “*The Properties of Gases and Liquids*” [44].
- [56] VAN DER WAALS, J. D., *Z. Phys. Chem.*, Vol. 13, pp. 716, 1894. Citado a partir de “*The Properties of Gases and Liquids*” [44].
- [57] BROCK, J. R., BIRD, R. B., *Surface Tension and the Principle of Corresponding States*, *AIChE J.*, Vol. 1, pp. 174-177, 1955.
- [58] SASTRI, S. R. S., RAO, K. K., *A New Group Contribution Method for Predicting Viscosity of Organic Liquids*, *Chem. Eng. J.*, Vol. 50, pp. 9-25, 1992.
- [59] REID, R. C., PRAUSNITZ, J. M., SHERWOOD, T. L. K., *The Properties of Gases and Liquids*, 3ed., New York: McGraw-Hill, 1977.
- [60] KUENSBERG, S. C., KONG, S. C., REITZ, R. D., *Modeling the Effects of Injector Nozzle Geometry on Diesel Sprays*, SAE Paper 1999-01-0912, 1999.
- [61] REITZ, R. D., *Modeling Atomization Processes in High Pressure Vaporizing Sprays*, *Atomization and Spray Tech.*, 1987.
- [62] LIU, Z., OBOKATA, T., REITZ, R. D., *Modelling Drop Drag Effects on Fuel Spray Impingement in Direct Injection Diesel Engines*, SAE Paper 970879, 1997.

- [63] TAYLOR, G. I., *The Instability of Liquid Surfaces when Accelerates in a Direction Perpendicular to their Planes*, The Scientific Papers of Sir Geoffery Igram Taylor, Vol. 3, pp. 532-536, Cambridge University Press, 1963.
- [64] SU, T. F., PATTERSON, M., REITZ, R. D., *Experimental and Numerical Studies of High Pressure Multiple Injection Sprays*, SAE Paper 960861, 1996.
- [65] PATTERSON, M. A., REITZ, R. D., *Modelling the Effect of Fuel Spray Characteristics on Diesel Engine Combustion and Emission*, SAE Paper 980131, 1998.
- [66] REITZ, R. D., BRACCO, F. V., *Mechanism of Breakup of Round Liquids Jets*, The Encyclopedia of Fluid Mechanism, Vol. 3, pp. 233-249, Houston: Gulf Publishing, 1986.
- [67] HALSTEAD, M., KIRSH, L., QUINN, C., *The Autoignition of Hydrocarbon Fuels at High Temperatures and Pressures - Fitting of a Mathematical Model*, Combust. Flame, Vol. 30, pp. 45-60, 1977.
- [68] HAMOSFAKIDIS, V., REITZ, R. D., *Optimization of a Hydrocarbon Fuel Ignition Model for Two Single Component Surrogates of Diesel Fuel*, Combust. Flame, Vol. 132, pp. 433-450, 2003.
- [69] SCHAPERTONS, H., LEE, W., *Multidimensional Modelling of Knocking Combustion in S.I. Engines*, SAE Paper 850502, 1985.
- [70] 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*, SAE Paper 940523, 1994.
- [71] SHUAI, S., ABANI, N., YOSHIKAWA, T., REITZ, R. D., PARK, S. W., *Simulating Low Temperature Diesel Combustion with Improved Spray Models*, International Journal of Thermal Sciences, Vol. 48, pp. 1786-1799, 2009.

[72] WAHIDUZZAMAN, S., FERGUSON, C. R., *Convective Heat Transfer from a Decaying Swirling Flow within a Cylinder*, 8th International Heat Transfer Conference, paper 86-IHTC-253, 1986.

[73] BANG, S. H., LEE, C. S., *Fuel Injection Characteristics and Spray Behavior of DME Blended with Methyl Ester Derived from Soybean Oil*, Fuel, Vol. 89, pp. 797–800, 2010.

[74] FANG, T., LIN, Y. C., FOONG, T. M., LEE, C. F., *Biodiesel Combustion in an Optical HSDI Diesel Engine Under Low Load Premixed Combustion Conditions*, Fuel, Vol. 88, pp. 2154–2162, 2009.

[75] RAKOPOULOS, C.D., ANTONOPOULOS, K.A., RAKOPOULOS, D.C., *Development and Application of Multi-Zone Model for Combustion and Pollutants Formation in Direct Injection Diesel Engine Running with Vegetable Oil or its Bio-Diesel*, Energy Conversion and Management, Vol. 48, pp. 1881–1901, 2007.

[76] CHMELA, F.G., ORTHAMBER, G.C., *Rate of Heat Release and its Prediction for Direct Injection Diesel Engines Based on Purely Mixing Controlled Combustion*, Society of Automotive Engineers, SAE Paper 1999-01-0186, 1999.

[77] TORMOS, B., NOVELLA, R., GARCÍA, A., GARGAR, K., *Comprehensive Study of Biodiesel Fuel for HSDI Engines in Conventional and Low Temperature Combustion Conditions*, Renewable Energy, Vol. 35, pp. 368–378, 2010.

[78] KONG, S. C., SENEAL, P. K., REITZ, R. D., *Developments in Spray Modeling in Diesel and Direct-Injection Gasoline Engines*, Oil & Gas Science and Technology, Vol. 54, No. 2, pp. 197-204, 1999.