



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

**DANIEL CARLOS DA SILVA**

**APLICAÇÃO DE MODELO DE CINÉTICA QUÍMICA REDUZIDA EM  
SIMULAÇÕES MULTIDIMENSIONAIS DE MOTORES DIESEL**

**FORTALEZA**

**2018**

DANIEL CARLOS DA SILVA

APLICAÇÃO DE MODELO DE CINÉTICA QUÍMICA REDUZIDA EM SIMULAÇÕES  
MULTIDIMENSIONAIS DE MOTORES DIESEL

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

Orientador: Prof. Dr. André Valente Bueno

FORTALEZA

2018

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

---

- S579a Silva, Daniel Carlos da.  
Aplicação de Modelo de Cinética Química Reduzida em Simulações Multidimensionais de Motores Diesel / Daniel Carlos da Silva. – 2018.  
84 f. : il. color.
- Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia, Curso de Engenharia Mecânica, Fortaleza, 2018.  
Orientação: Prof. Dr. André Valente Bueno.
1. Cinética química. 2. Dinâmica dos fluidos computacional. 3. Combustão. 4. Motores diesel. I. Título.  
CDD 620.1
-

DANIEL CARLOS DA SILVA

APLICAÇÃO DE MODELO DE CINÉTICA QUÍMICA REDUZIDA EM SIMULAÇÕES  
MULTIDIMENSIONAIS DE MOTORES DIESEL

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

Aprovada em:

BANCA EXAMINADORA

---

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

---

Prof. Dr. Claus Franz Wehmann  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Maria Alexsandra de Sousa Rios  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

À minha família, a qual nunca hesitou em me apoiar.

## AGRADECIMENTOS

A realização deste trabalho dependeu direta ou indiretamente de várias pessoas as quais me sinto na obrigação de agradecer. Por isso, agradeço:

À minha família. A sabedoria e carinho dos meus pais Ana e Francisco sempre tiveram grande influência nas minhas decisões e a grande amizade da minha irmã Amanda é algo precioso que guardo com bastante carinho;

Aos meus amigos Andrezza, Geilson, Ruiten, Larissa, Thais e Annita, por todas as histórias que temos o prazer de contar e recontar e pela compreensão dos meus momentos de ausência;

À diretoria do trailer, composta por pessoas que tive sorte de conhecer no curso de Engenharia Mecânica: Isabela, Matheus, Mônica, Leonardo, Jean, Samyo, Victor, PV, Rodolfo, Jefferson e Igor;

Aos amigos que adquiri no laboratório: Jack, Thales, Victim, Victao, Mariana, quem não mede esforços ao ajudar a quem precisa, seu Laércio, pelos sábios conselhos de vida, Ricardo, pelas risadas e reflexões, e André Bueno, pela paciência extra ao lidar com um aluno desesperado;

Ao bonde de Sentinel Towers: Vinícius, Jean, Daniela, Marina e João;

E a muitos outros. A quantidade de pessoas que deixaram suas marcas ao longo desses cinco anos e meio é grande o suficiente para eu temer não conseguir entregar este trabalho a tempo caso eu agradeça a todos.

“Até que um dia você descobre que dez anos ficaram para trás. Ninguém te disse quando começar a correr, você perdeu o tiro de largada.”

(Roger Waters, Time - Pink Floyd)

## RESUMO

O surgimento de simulações numéricas mudou o rumo de desenvolvimento de motores de combustão interna, uma vez que legislações ambientais se encontram cada vez mais restritas. Descrever fielmente os diferentes eventos que ocorrem na combustão de um motor diesel, como injeção direta, quebra, evaporação, formação de mistura e autoignição é uma tarefa desafiante. Portanto, a abordagem das simulações de tais processos pode apresentar diferentes níveis de complexidade.

Este trabalho propôs a análise do nível de complexidade de modelos de cinética química e quebra de gotas, comparando uma versão alterada com a original do *software* Kiva-3V. Os modelos de quebra comparados foram o *Taylor Analogy Breakup* e o *Blob Kelvin-Helmholtz Rayleigh-Taylor*. A cinética química detalhada foi calculada utilizando a biblioteca CHEMKIN-II com a integração do sistema de equações diferenciais ordinárias rígido através do pacote de integração VODE. A influência da turbulência na cinética química não foi considerada, sendo a validade dessa hipótese um dos objetos de interesse do trabalho.

Os resultados indicam que a utilização de um modelo de quebra de gotas que leva em consideração mais de um mecanismo de quebra, o *Blob-KH-RT*, tornou a simulação mais similar ao caso observado na realidade. O comprimento de quebra da versão modificada apresentou uma redução de 58% do comprimento da versão original  $10^\circ$  após o início da injeção e a estrutura da mistura combustível-ar foi similar ao observado na literatura. Além disso, o aumento do detalhamento da cinética química permitiu que o avanço das reações de pré-combustão se desse de forma gradual, prevendo o período de atraso de ignição de acordo com os dados experimentais. O progresso da combustão apresentou comportamento mais acelerado que o caso real, evidenciando a necessidade de utilização de modelos de combustão turbulenta.

**Palavras-chave:** Cinética química. Dinâmica dos fluidos computacional. Combustão. Motores diesel.



## ABSTRACT

The appearance of numerical simulations changed the course of the development of internal combustion engines, since environmental legislation is increasingly becoming more restricted. To describe the several events that occur in the combustion of a diesel engine, such as the direct injection, droplets breakup, vaporization, mixture formation and auto-ignition is a challenging task. Therefore, the approach of the simulations of such processes can present different levels of complexity.

This work proposed the analysis of the level of complexity of chemical kinetics and break-up models, comparing an altered version with the original version of the Kiva-3V software. The compared break-up models were the Taylor Analogy Break-up and the Blob Kelvin-Helmholtz Rayleigh-Taylor. The detailed chemical kinetics was calculated using the CHEMKIN-II library with the integration of the stiff ordinary differential equations done with the VODE integration package. The influence of turbulence on the chemical kinetics was not considered, where the validity of such hypothesis being a object of interest of the work.

The results indicate that the utilization of a break-up model that takes into account more than one break-up mechanism, the Blob-KH-RT, made the simulation more similar to the case observed in the real case. The break-up length of the modified version presented a reduction of 58% of the break-up length of the original version  $10^\circ$  after the start of injection and the structure of the fuel-air mixture was similar to the ones observed in the literature. In addition, the increasing of the detail level of chemical kinetics allowed the advance of the pre-combustion reactions to occur gradually, predicting the ignition delay period in agreement with the experimental data. The combustion progress presented an accelerated behaviour compared to the real case, highlighting the requirement of the utilization of a turbulent combustion model.

**Keywords:** Chemical kinetics. Computational fluid dynamics. Combustion. Diesel Engines.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Evolução das restrições da regulamentação de emissões na Europa . . . . .	21
Figura 2 – Etapas de um motor de quatro tempos com injeção direta . . . . .	22
Figura 3 – Esquema da estrutura do spray . . . . .	24
Figura 4 – Imagem de um spray por duas diferentes técnicas de iluminação . . . . .	25
Figura 5 – Esquema dos mecanismos de quebra . . . . .	26
Figura 6 – Histograma de quantidade de gotas e fração de volume injetado . . . . .	27
Figura 7 – Relação entre as propriedades de uma gota na sua evaporação . . . . .	28
Figura 8 – Esquema do <i>spray</i> em um ambiente com <i>swirl</i> . . . . .	29
Figura 9 – Curvas de pressão, taxa de liberação de energia e levantamento da agulha . .	31
Figura 10 – Esquema das regiões do spray durante a fase da combustão difusiva . . . . .	31
Figura 11 – Esquemas de interpolação comumente utilizados . . . . .	34
Figura 12 – Exemplo da velocidade de um escoamento turbulento transiente . . . . .	36
Figura 13 – Modelo combinado <i>blob</i> -KH-RT . . . . .	40
Figura 14 – Visualização esquemática da evaporação da gota . . . . .	41
Figura 15 – Mecanismos de colisão entre gotas. . . . .	41
Figura 16 – Ilustração esquemática dos regimes de impacto. . . . .	42
Figura 17 – Distribuição de carbono no Diesel . . . . .	46
Figura 18 – Curvas normalizadas das taxas das reações em regimes laminar e turbulento	49
Figura 19 – Conceito de um reator parcialmente misturado . . . . .	54
Figura 20 – O procedimento de reação seguido de mistura . . . . .	55
Figura 21 – Formato do pistão do motor de referência . . . . .	56
Figura 22 – Dados de pressão e liberação de energia do motor de referência a 2100 <i>rpm</i>	57
Figura 23 – Contorno do copo do pistão . . . . .	64
Figura 24 – Malhas utilizadas no estudo de convergência . . . . .	64
Figura 25 – Curva de taxa de liberação de energia na convergência do domínio . . . . .	66
Figura 26 – Curva de taxa de liberação de energia na convergência da região do <i>spray</i> . .	67
Figura 27 – Malha escolhida após o estudo de convergência . . . . .	67
Figura 28 – Comparação do comprimento de quebra . . . . .	68
Figura 29 – Comparação da formação da mistura ar-combustível . . . . .	69
Figura 30 – Curvas de pressão no cilindro: simulações e experimental . . . . .	70
Figura 31 – Curvas de taxa de liberação de energia: simulações e experimental . . . . .	70

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Limites de emissões para veículos leves movidos a diesel . . . . .	20
Tabela 2 – Faixas de valores de $We$ para os mecanismos de quebra . . . . .	26
Tabela 3 – Valores recomendados para o modelo $k - \epsilon$ . . . . .	38
Tabela 4 – Especificações técnicas do motor de referência . . . . .	56
Tabela 5 – Resumo dos dois casos estudados . . . . .	63
Tabela 6 – Condições iniciais e de contorno . . . . .	65

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

<i>CFD</i>	Dinâmica dos Fluidos Computacional
<i>CTCM</i>	<i>Characteristic Time Combustion Model</i>
<i>DNS</i>	<i>Direct Numerical Simulation</i>
<i>EBU</i>	<i>Eddy Break-Up</i>
<i>EDCM</i>	<i>Eddy Dissipation Combustion Model</i>
<i>EGR</i>	Recirculação dos Gases de Exaustão
<i>LES</i>	<i>Large Eddy Simulation</i>
<i>PSR</i>	<i>Perfectly Stirred Reactor</i>
<i>PaSR</i>	<i>Partially Stirred Reactor</i>
<i>RANS</i>	Navier-Stokes com médias de Reynolds
<i>SMD</i>	Diâmetro Médio de Sauter
<i>TAB</i>	Taylor Analogy Breakup
AVE	abertura da válvula de escape
CN	número de cetano
EDO	Equação Diferencial Ordinária
FVA	fechamento da válvula de admissão
LMCI	Laboratório de Motores de Combustão Interna da Universidade Federal do Ceará
MP	material particulado
NO <sub>x</sub>	óxidos de nitrogênio
PMI	ponto morto inferior
PMS	ponto morto superior

## LISTA DE SÍMBOLOS

$C_{D,esf}$	Coeficiente de arrasto de uma gota esférica
$c_k$	Concentração molar da espécie $k$
$Da$	Número de Damköhler
$d_{32}$	Diâmetro médio de Sauter $k$
$e$	Energia interna
$f_{as}$	Razão combustível-ar mássica estequiométrica
$isfc$	Consumo específico de combustível indicado
$K_{c,i}$	Constante de equilíbrio da reação $i$
$M(k)$	Massa molar da espécie $k$
$m_k$	Massa da espécie $k$
$n_k$	Número de mols da espécie $k$
$p$	Pressão
$q_i$	Taxa de progresso da reação $i$
$R$	Constante universal dos gases
$Re$	Número de Reynolds
$s_P$	Emissão específica do poluente P
$T_\tau$	Tensor de tensões viscosas
$W_{c,i}$	Trabalho indicado bruto por cilindro
$We$	Número de Weber
$Y_k$	Fração mássica da espécie $k$
$\delta_{i,j}$	Delta de Kronecker
$\varepsilon$	Dissipação da energia cinética turbulenta
$\phi$	Razão de equivalência
$k$	Energia cinética turbulenta
$\mu$	Viscosidade
$\mu_t$	Viscosidade turbulenta

$v'_{k,i}$	Coeficiente estequiométrico da espécie $k$ nos reagentes da reação $i$
$v''_{k,i}$	Coeficiente estequiométrico da espécie $k$ nos produtos da reação $i$
$\dot{\omega}_k$	Taxa de variação de concentração da espécie $k$
$\tau_{ij}$	Tensão devido à viscosidade
$\tau_{ij,t}$	Tensão de Reynolds
$\tau_{química}$	Escala de tempo característica química
$\tau_{turbulência}$	Escala de tempo característica turbulenta
$\rho$	Densidade
$\sigma_{sup}$	Tensão superficial
$\zeta$	Razão ar-combustível molar estequiométrica

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	17
<b>2</b>	<b>OBJETIVOS</b>	19
<b>2.1</b>	<b>Geral</b>	19
<b>2.2</b>	<b>Específicos</b>	19
<b>3</b>	<b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b>	20
<b>3.1</b>	<b>Motores de combustão interna de ciclo diesel</b>	20
<b>3.1.1</b>	<i>Contexto histórico</i>	20
<b>3.1.2</b>	<i>Cenário atual</i>	20
<b>3.1.3</b>	<i>Funcionamento de um motor</i>	21
<b>3.1.4</b>	<i>Mistura combustível-ar</i>	22
<b>3.1.5</b>	<i>Parâmetros de performance e emissões</i>	23
<b>3.2</b>	<b>Injeção direta de diesel</b>	24
<b>3.2.1</b>	<i>Quebra das gotas</i>	25
<b>3.2.2</b>	<i>Diâmetro das gotas</i>	27
<b>3.2.3</b>	<i>Evaporação</i>	28
<b>3.2.4</b>	<i>Desenvolvimento do spray e mistura ar/combustível</i>	29
<b>3.2.5</b>	<i>Auto-ignição e progresso da combustão</i>	29
<b>3.2.5.1</b>	<i>Combustão pré-misturada</i>	30
<b>3.2.5.2</b>	<i>Combustão difusiva</i>	30
<b>3.3</b>	<b>Simulação numérica de motores de combustão interna</b>	31
<b>3.3.1</b>	<i>Resolução das Equações de Transporte</i>	32
<b>3.3.2</b>	<i>Turbulência</i>	33
<b>3.3.2.1</b>	<i>O fenômeno da turbulência</i>	34
<b>3.3.2.2</b>	<i>Abordagens</i>	35
<b>3.3.2.3</b>	<i>Equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds (RANS)</i>	36
<b>3.3.2.4</b>	<i>Modelo de Turbulência k-ε</i>	37
<b>3.3.3</b>	<i>Injeção de combustível</i>	38
<b>3.3.3.1</b>	<i>Quebra das gotas</i>	39
<b>3.3.3.2</b>	<i>Efeito do arrasto</i>	40
<b>3.3.3.3</b>	<i>Evaporação</i>	40

3.3.3.4	<i>Colisão entre gotas</i>	41
3.3.3.5	<i>Choque contra a parede</i>	42
3.3.4	<i>Auto-ignição e progresso da combustão</i>	42
3.4	<b>Cinética química da combustão</b>	43
3.4.1	<i>Modelo de Arrhenius</i>	44
3.4.2	<i>Reações de cinética química do diesel</i>	45
3.5	<b>O problema da combustão em ambiente turbulento</b>	46
3.5.1	<i>Avaliação matemática do problema</i>	47
3.5.2	<i>Avaliação experimental do problema</i>	48
3.6	<b>Modelos de Combustão Turbulenta</b>	49
3.6.1	<i>Reator Perfeitamente Agitado</i>	50
3.6.2	<i>Eddy Dissipation Combustion Model</i>	50
3.6.3	<i>Modelo de Combustão de Tempos Característicos</i>	51
3.6.4	<i>Reator Parcialmente Agitado</i>	53
4	<b>METODOLOGIA</b>	56
4.1	<b>Motor em estudo</b>	56
4.2	<b>Abordagem numérica</b>	57
4.2.1	<i>Alterações no Kiva-3V</i>	58
4.3	<b>Implementação do Reator Perfeitamente Agitado</b>	59
4.3.1	<i>Integração pelo método semi-implícito</i>	59
4.3.2	<i>Integração pelo VODE</i>	61
4.4	<b>Resumo dos casos estudados</b>	63
4.5	<b>Geração da malha</b>	63
4.6	<b>Condições iniciais e de contorno</b>	65
5	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	66
5.1	<b>Convergência de malha</b>	66
5.2	<b>Análise qualitativa</b>	67
5.2.1	<i>Comprimento de quebra</i>	67
5.2.2	<i>Formação da mistura ar-combustível</i>	68
5.3	<b>Curvas de pressão e taxa de liberação de energia</b>	69
6	<b>CONCLUSÃO</b>	73
	<b>REFERÊNCIAS</b>	74



<b>APÊNDICES</b> . . . . .	78
<b>APÊNDICE A</b> – Subrotina da implementação do modelo PSR . . . . .	78
<b>ANEXOS</b> . . . . .	80
<b>ANEXO A</b> – Fluxograma do funcionamento do Kiva-3V . . . . .	81

## 1 INTRODUÇÃO

A cada década, regulamentações ambientais se tornam mais restritas, exigindo aumentos da tecnologia de motores de combustão interna que visem a redução de emissões de poluentes. Simulações numéricas que emulam situações físicas reais se mostram como uma ferramenta poderosa para estudar os efeitos das variações de parâmetros sem a utilização de aparatos experimentais, ainda que elas precisem ser validadas.

A combustão em motores diesel envolve fenômenos complexos, que vão desde a sua injeção direta até o fim da queima, passando por processos de quebra de gotas, colisões, evaporação, formação de mistura, reações de pré-combustão, auto-ignição e o avanço da combustão. Em uma mesma região, a faixa de temperatura varia entre 1000 *K* e 2700 *K* e a de razão de equivalência varia entre 0,5 e 6 (DEC, 1997). O avanço da tecnologia dos computadores, em paralelo com o avanço das pesquisas, resultou em modelos que têm capacidade de levar em consideração todos esses processos que ocorrem na câmara (BAUMGARTEN, 2006).

O aumento da complexidade de tais modelos, no entanto, pode ser vital para uma descrição adequada do ciclo do motor. A quebra das gotas logo após suas saídas do bico injetor, por exemplo, é um evento que tem grande influência sobre os processos subsequentes, onde descrições mais detalhadas exigem a simulação do escoamento do combustível na linha interna do injetor. Modelos que são utilizados em simulações onde tal precisão não é requerida, ainda que sejam menos exatas, também apresentam diferentes níveis de complexidade (BAUMGARTEN, 2006).

Um dos desafios de simulações de combustão é a abordagem da cinética química. A queima em si é uma cadeia complexa de reações que transformam os reagentes em espécies químicas intermediárias, bastante instáveis, até as espécies que compõem o produto final. No entanto, por muitos anos, os estudos simplificaram o processo para mecanismos de apenas uma ou poucas etapas com a hipótese de que a combustão é um processo que ocorre infinitamente rápido (POINSOT; VEYNANTE, 2005). Estudos recentes indicam que tal simplificação omite eventos que podem ser relevantes em processos como o atraso de ignição e formação de poluentes. Além disso, é importante definir como a turbulência influencia na cinética química. Foram propostos modelos que negligenciam seu efeito, outros que consideram que ela é a maior reguladora do progresso da combustão, sem a influência da química, e outros intermediários, os quais consideram que a influência da turbulência aumenta gradativamente ao longo do progresso, dependendo das condições do escoamento e da completude da combustão (STIESCH, 2003).

O objetivo deste trabalho é analisar a influência do aumento da complexidade da abordagem da cinética química e do modelo de quebra de gotas, verificando seus efeitos no atraso de ignição e no progresso da combustão, além de avaliar a importância da utilização de um modelo que considere o efeito da turbulência na cinética química. A proposta é alcançar o objetivo a partir de simulações utilizando modelos multidimensionais de um motor de ciclo diesel.

## 2 OBJETIVOS

### 2.1 Geral

Analisar o efeito da implementação de cinética química complexa em uma simulação multidimensional de um motor diesel, verificando a previsão do período de atraso de ignição e do progresso da combustão ao longo do ciclo do motor.

### 2.2 Específicos

Os objetivos específicos são inerentes ao alcance do objetivo geral, exceto pela verificação do modelo de quebra de gotas, o qual está incluso devido à utilização de um código fonte já modificado anteriormente. Os objetivos específicos são:

- Alterar o código fonte do *software* Kiva-3V para a implementação descrita no objetivo geral;
- Verificar se um modelo de combustão que considere a interação entre a turbulência e a cinética química é necessário na simulação de um motor diesel;
- Avaliar a influência da implementação de um modelo de quebra de gotas que leve em consideração mais de um mecanismo de quebra no spray de diesel.

### 3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

#### 3.1 Motores de combustão interna de ciclo diesel

##### 3.1.1 Contexto histórico

O propósito dos motores de combustão interna é transformar a energia proveniente de reações químicas em energia mecânica. O processo de desenvolvimento e melhoria do motor de ignição compressão originalmente inventado por Rudolf Diesel no fim do século XIX resultou em motores com eficiência térmica que ultrapassa 50% (KAMIMOTO; KOBAYASHI, 1991). Os motores Diesel se diferenciam do Otto pela injeção direta de combustível na câmara de combustão formada pelo conjunto cilindro-pistão do motor e pela ignição do combustível por meio dos efeitos da alta compressão da câmara, sendo a alta taxa de expansão um dos motivos para a alta eficiência (HEYWOOD, 1988).

##### 3.1.2 Cenário atual

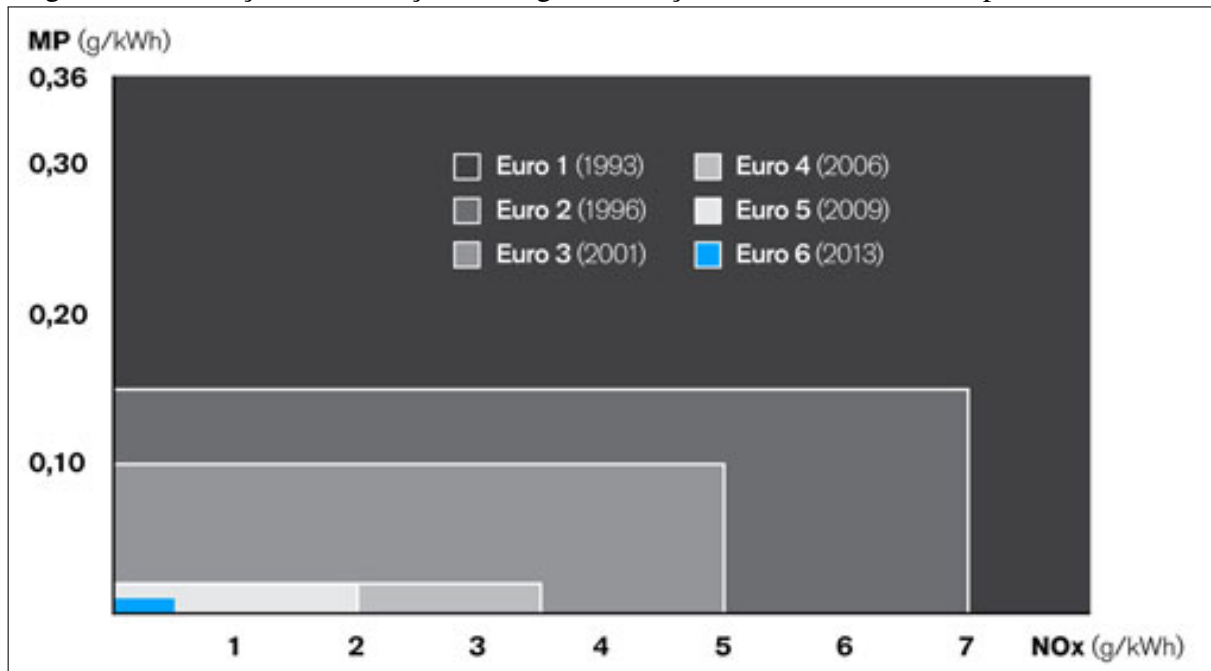
O impacto ambiental causado pelos motores de combustão interna foi primeiramente notado quando sua utilização foi relacionada com a presença de *smog*, uma poluição concentrada em formato de névoa (HEYWOOD, 1988). Nas últimas décadas, legislações que controlam as emissões de poluentes ficaram mais rígidas. Padrões europeus, por exemplo, diminuíram drasticamente a concentração permissível de óxidos de nitrogênio (NO<sub>x</sub>) e material particulado (MP) em um período de 20 anos, como mostra a Figura 1. No Brasil, a regulamentação limita as emissões de acordo com os valores mostrados na Tabela 1 para todos os veículos leves movidos a óleo diesel comercializados desde 2015.

Tabela 1 – Limites de emissões para veículos leves movidos a diesel

Poluente	Limites (g/km)
Monóxido de carbono (CO)	1,30
Hidrocarbonetos (HC)	0,30
Óxidos de nitrogênio (NO <sub>x</sub> )	0,08
Material particulado (MP)	0,025

Fonte: valores retirados do manual disponibilizado online por Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis (2011).

Figura 1 – Evolução das restrições da regulamentação de emissões na Europa



Fonte: adaptado de Elgas (2018).

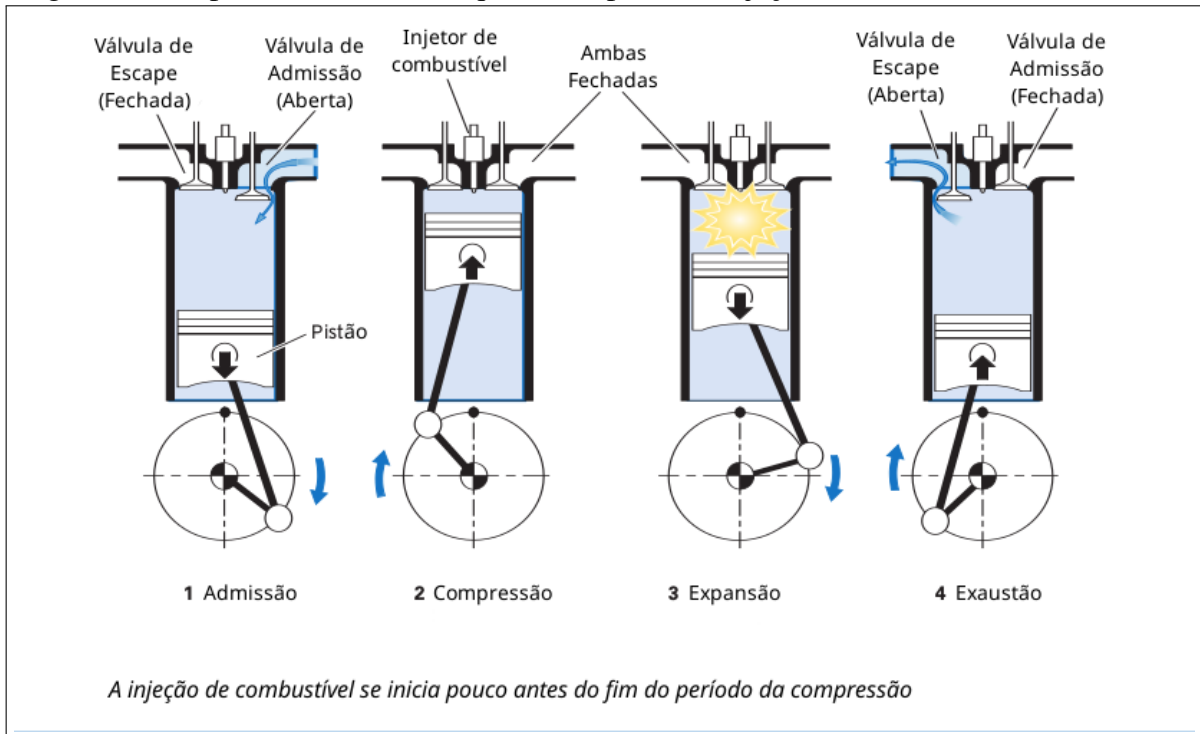
A tecnologia envolvida no projeto de motores diesel precisa se adaptar ao aumento das restrições ambientais pra que sua utilização não seja descontinuada. O desenvolvimento de um motor diesel, no entanto, é uma tarefa onerosa e que leva tempo. A utilização de simulação numérica tem sido uma boa forma de contornar esses empecilhos, além de ter facilitado a utilização de estratégias de otimização de parâmetros geométricos e de controle do motor, como a implementação de algoritmos genéticos, que há décadas são utilizados em motores de combustão interna (BENAJES *et al.*, 2018). Mesmo que as simulações numéricas necessitem de dados experimentais para suas validações, um aumento na confiabilidade dos modelos utilizados por motores virtuais parece ser o caminho para a fabricação de motores diesel mais ambientalmente limpos.

### 3.1.3 Funcionamento de um motor

Os motores de combustão interna podem ser diferenciados entre dois e quatro tempos. Como indica a classificação, cada cilindro de um motor de quatro tempos tem quatro estágios que juntos compõem ciclo. Em um motor de combustão interna, ar é admitido na câmara de combustão até o fechamento da válvula de admissão (FVA), quando o pistão está próximo ao ponto morto inferior (PMI), concluindo a fase da admissão. O pistão então volta em direção ao ponto morto superior (PMS), período onde o gás enclausurado é comprimido, ocorre a injeção

direta de combustível e, após o atraso de ignição, a alta temperatura com a mistura provoca a ignição, concluindo a fase da compressão. A liberação de energia da combustão aumenta a pressão na câmara, empurrando o pistão e concluindo a fase da expansão. Ocorre então a abertura da válvula de escape (AVE) e os produtos são expulsados, concluindo a fase da exaustão. O processo descrito é ilustrado na Figura 2.

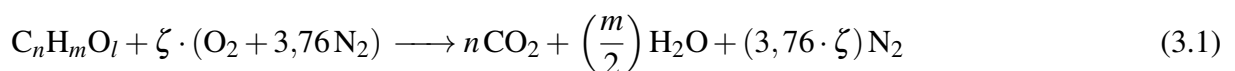
Figura 2 – Etapas de um motor de quatro tempos com injeção direta



Fonte: adaptado de Chevron Global Marketing (2007).

### 3.1.4 Mistura combustível-ar

A combustão completa de um hidrocarboneto segue a reação mostrada na Equação 3.1, onde a razão ar-combustível molar estequiométrica,  $\zeta$ , é calculada pela Equação 3.2.



$$\zeta = n + \frac{m}{4} - \frac{l}{2} \quad (3.2)$$

O excesso ou a falta de combustível é definido em relação à proporção estequiométrica de combustível e ar. Caso a quantidade de mols de ar seja tal que, para  $\zeta$  mols de ar existe 1

mol de combustível, a mistura é estequiométrica e o combustível não está nem em excesso e nem em falta. Essa razão também é comumente definida em base mássica, seguindo a Equação 3.3.

$$fas = \left( \frac{m_{\text{combustível}}}{m_{\text{ar}}} \right)_{\text{estequiométrica}} = \frac{n \cdot M(\text{C}) + m \cdot M(\text{H}) + l \cdot M(\text{O})}{\zeta \cdot (M(\text{O}_2) + 3,76 \cdot M(\text{N}_2))} \quad (3.3)$$

Um parâmetro muito utilizado para caracterizar a mistura é a razão de equivalência,  $\phi$ . Ele relaciona a razão combustível-ar real com a estequiométrica, como mostrado na Equação 3.4. Se a razão de equivalência for igual a 1, a mistura é estequiométrica. Se for maior a mistura é rica (excesso de combustível) e se for menor a mistura é pobre (falta de combustível).

$$\phi = \frac{(n_{\text{combustível}}/n_{\text{ar}})}{(1/\zeta)} = \frac{(m_{\text{combustível}}/m_{\text{ar}})}{fas} \quad (3.4)$$

### 3.1.5 Parâmetros de performance e emissões

Uma vez que o principal objetivo do motor é a geração de potência, um dos parâmetros fundamentais para a análise do motor é a potência de frenagem. Esta é definida como potência gerada pelo motor no eixo de manivelas após sofrer reduções devido às irreversibilidades. No entanto, quando apenas a câmara de combustão é analisada, não é possível prever a eficiência mecânica. O trabalho indicado bruto por cilindro,  $W_{c,i}$ , é calculado pela integral mostrada na Equação 3.5 durante o período onde a câmara de combustão é um sistema fechado, ou seja, entre o FVA e AVE (HEYWOOD, 1988).

$$W_{c,i} = \oint p \cdot dV \quad (3.5)$$

O consumo de combustível pode ser relacionado com a potência gerada através do consumo específico de combustível indicado por cilindro,  $isfc$ . Como mostrado na Equação 3.6, ele é a massa de combustível necessária para o trabalho indicado gerado em um cilindro.

$$isfc = \frac{m_{\text{injetada}}}{W_{c,i}} \quad (3.6)$$

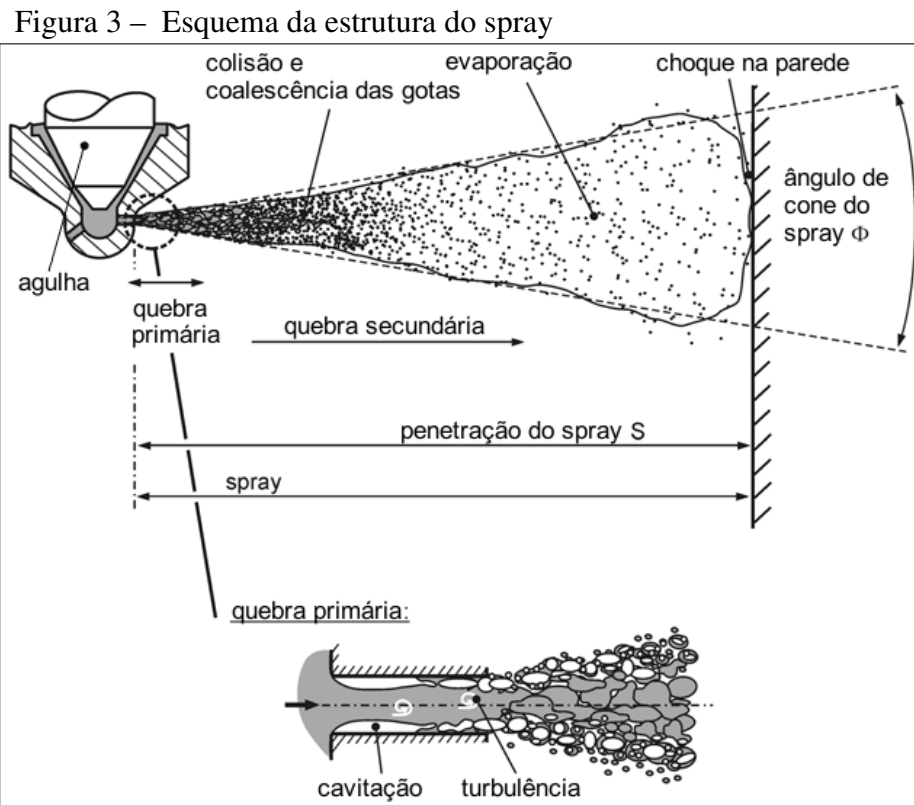
A emissão de poluentes também pode ser relacionada com a potência gerada pela emissão específica do poluente P,  $sP$ , de forma análoga ao consumo específico, como mostrado pela Equação 3.7, onde  $m_P$  é a massa do poluente no fim do ciclo.

$$sP = \frac{m_P}{W_{c,i}} \quad (3.7)$$



### 3.2 Injeção direta de diesel

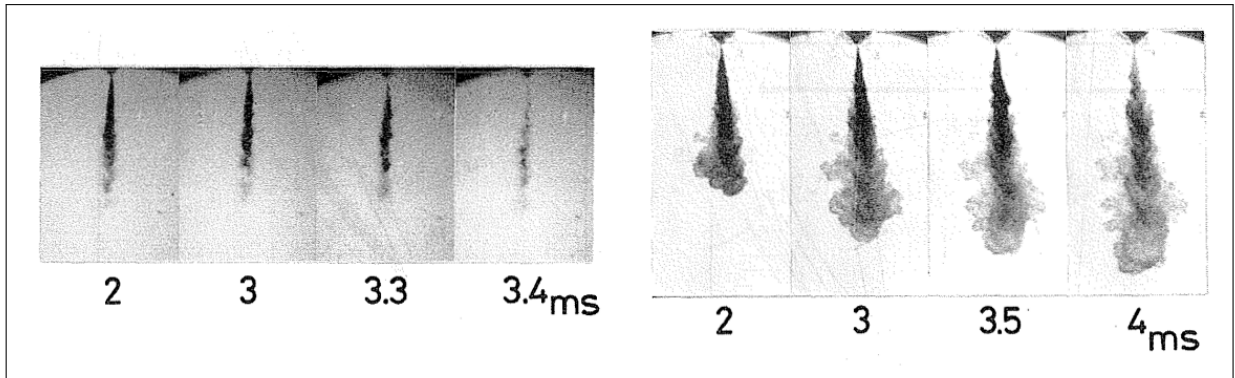
A injeção direta de diesel na câmara de combustão ocorre pela liberação da agulha do bico injetor, permitindo a passagem do combustível a altas velocidades através de orifícios com diâmetros que variam entre 0,2 e 1 *mm*. A alta velocidade ocorre devido à alta pressão de fornecimento do combustível, onde sistemas atuais de injeção, *common rail*, podem fornecer pressões acima de 2500 *bar*. Esses altos valores de pressão são necessários para a formação da mistura de ar e vapor de combustível em condições propícias à auto-ignição. É desejável que o combustível injetado evapore e se misture com a maior quantidade possível de ar disponível na câmara de combustão, condições fornecidas pela alta pressão (HEYWOOD, 1988). A estrutura do *spray* resultante da injeção é mostrada na Figura 3.



Devido à alta velocidade na saída do orifício, o jato de combustível se encontra no regime de atomização, o qual resulta em gotas muito menores que o diâmetro do orifício (HEYWOOD, 1988), diferentemente dos outros regimes de quebra de jato. As gotas resultantes penetram a câmara formando um cone e se quebram em gotas menores durante uma região de quebra, ou *breakup*. Afastando-se do orifício, a quantidade de ar entre as gotas aumenta, dispersando o *spray*, diminuindo suas velocidades e evaporando-as. As mais afastadas evaporam

primeiro, criando uma pluma de vapor ao redor do combustível líquido, enquanto o *spray* continua a adentrar a câmara de combustão, podendo interagir com as paredes da câmara. A Figura 4 mostra o *spray* através de dois métodos diferentes de obtenção de imagens em alta velocidade, onde o da esquerda mostra o combustível líquido e o da direita mostra o vapor. É possível observar que a maior parte do *spray* é composta pela pluma de vapor ao redor do jato principal.

Figura 4 – Imagem de um *spray* por duas diferentes técnicas de iluminação



Fonte: Kamimoto *et al.* (1981).

### 3.2.1 Quebra das gotas

As gotas sofrem esforços causados pela distribuição de pressão em suas superfícies. Lefebvre e McDonell (2017) explicam que a pressão interna de um ponto na superfície de uma gota  $P_I$  em estado de equilíbrio balanceia o efeito das pressões devidas à aerodinâmica  $P_a$  e a pressão resultante da tensão superficial  $P_\sigma$ , como mostrado na Equação 3.8, onde  $\sigma$  é a tensão superficial e  $d$  é o diâmetro da gota. A pressão devido à tensão superficial segue a Equação 3.9. À medida que as pressões aerodinâmicas oscilam, as deformações alteram seu valor de modo compensatório a fim de manter a igualdade da Equação 3.8 verdadeira.

$$P_I = P_a + P_\sigma \quad (3.8)$$

$$P_\sigma = \frac{4 \cdot \sigma_{sup}}{d} \quad (3.9)$$

Para pressões aerodinâmicas muito altas, a deformação resultante diminui  $P_\sigma$  a ponto de ocorrer a quebra da gota em gotas menores, as quais, de acordo com a Equação 3.9, têm maiores valores de forças devido à tensão superficial. O tempo necessário para a quebra da gota

é chamado tempo de quebra. O processo de quebra ocorre até o diâmetro ser tal que  $P_{\sigma}$  é alto o suficiente para sempre compensar as variações de  $P_a$ , mantendo sua estrutura estável e com um tempo de quebra infinito.

O número que relaciona a influência das forças aerodinâmicas e as forças resultantes da resultantes da tensão superficial é o número de Weber, mostrado na Equação 3.10, onde  $\rho_g$  é a densidade do gás nas redondezas da gota e  $u_{rel}$  é a velocidade relativa entre a gota e o gás. Seu valor permite classificar a quebra em diferentes tipos, os quais não são definidos de forma consistente na literatura (BAUMGARTEN, 2006). Em um dos estudos voltados para a caracterização dos tipos de quebra, Pilch e Erdman (1987) dividem os mecanismos em 5 grupos, onde suas relações com o número de Weber são mostrados na Tabela 2 e seus formatos são esquematizados na Figura 5.

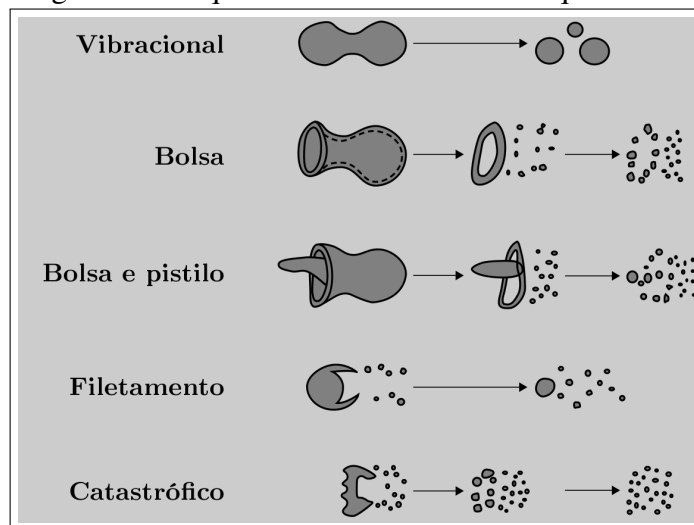
$$We = \frac{\rho_g \cdot u_{rel}^2 \cdot d}{\sigma_{sup}} \quad (3.10)$$

Tabela 2 – Faixas de valores de  $We$  para os mecanismos de quebra

Mecanismo de quebra	Faixa de ocorrência do mecanismo
1. Vibracional	$We \leq 12$
2. Bolsa	$12 < We \leq 50$
3. Bolsa e pistilo	$50 < We \leq 100$
4. Filetamento	$100 < We \leq 350$
5. Catastrófico	$We > 350$

Fonte: adaptado de Pilch e Erdman (1987).

Figura 5 – Esquema dos mecanismos de quebra



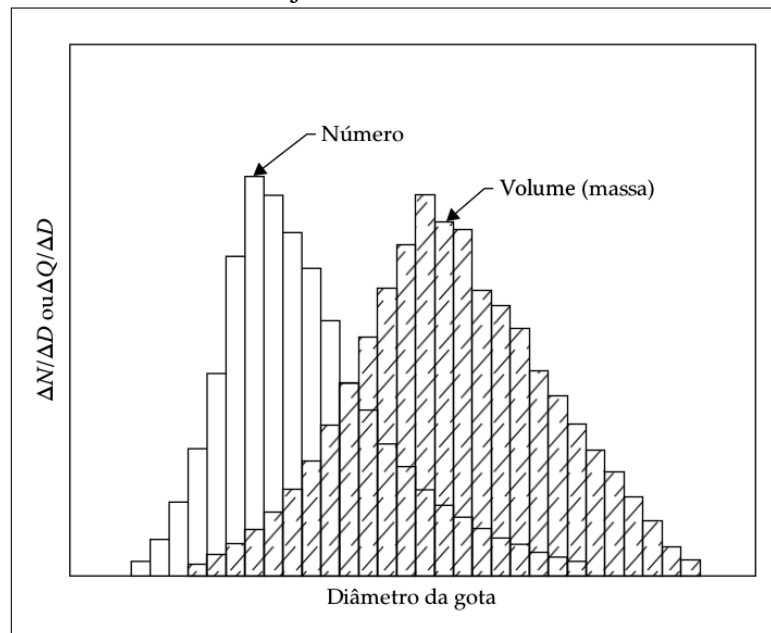
Fonte: adaptado de Lefebvre e McDonell (2017).

### 3.2.2 Diâmetro das gotas

A qualidade da atomização pode ser avaliada pela quantidade de gotas geradas a partir da quebra das gotas. Um exemplo de histograma quantidade e fração de volume de gotas de diferentes diâmetros é mostrada na Figura 6, a qual é comumente aproximada pela função distribuição acumulada de Rosin-Rammler, mostrado na Equação 3.11, onde  $X$  e  $q$  são constantes e  $Q$  é a fração do volume total contido em gotas de diâmetro menor que  $d$  (LEFEBVRE; MCDONELL, 2017). Os tamanhos das gotas têm papel relevante no processo de combustão, uma vez que pequenas gotas sofrem o efeito do arrasto de forma mais acentuada – o que afeta a penetração do *spray*, além de influenciarem na taxa de evaporação devido ao aumento da área superficial em contato com o gás.

$$1 - Q = \exp(-d/X)^q \quad (3.11)$$

Figura 6 – Histograma de quantidade de gotas e fração de volume injetado



Fonte: adaptado de Lefebvre e McDonell (2017).

A fim de caracterizar o *spray*, a relação mostrada pela Equação 3.12 é comumente utilizada, onde a alteração dos valores de  $a$  e  $b$  resultam em diferentes parâmetros relacionados à média dos diâmetros das gotas, e cada um é adequado para um finalidade específica (LEFEBVRE; MCDONELL, 2017). Um parâmetro muito utilizado em motores de combustão interna é o Diâmetro Médio de Sauter (*SMD*),  $d_{32}$ , com  $a = 3$  e  $b = 2$ , o qual relaciona o volume injetado,

relacionado com a massa de combustível disponível para a queima; com a área superficial, região onde ocorre a transferência de massa por evaporação (HEYWOOD, 1988).

$$d_{ab} = \left[ \frac{\sum N_i \cdot d_i^a}{\sum N_i \cdot d_i^b} \right]^{1/(a-b)} \quad (3.12)$$

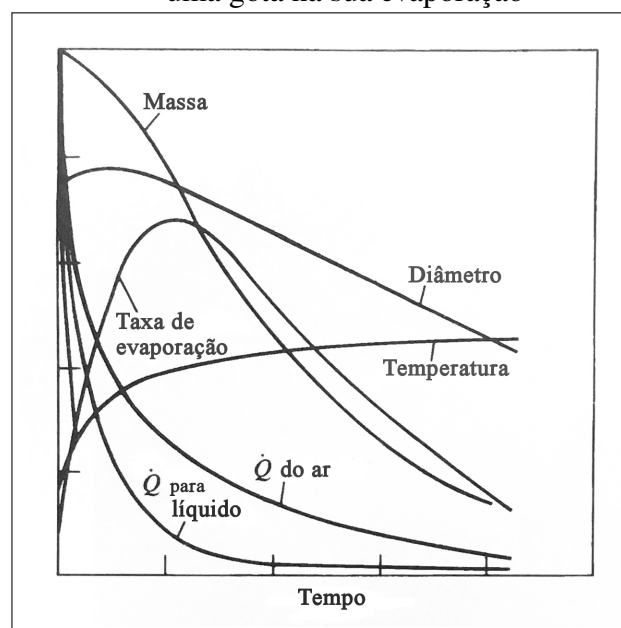
### 3.2.3 Evaporação

O diâmetro das menores gotas variam entre 20 e 100  $\mu m$ . Uma gota que está dispersa, como acontece na ponta do *spray*, sofre efeito principalmente de três diferentes fenômenos de transporte: arrasto do ar, troca de calor com o ar e transferência de massa por vaporização. Heywood (1988) descreve as interações entre os fenômenos da seguinte maneira:

À medida que a temperatura da gota aumenta devido à transferência de calor, a pressão de vapor do combustível aumenta e a taxa de evaporação aumenta. À medida que a taxa de transferência de massa de vapor para longe da gota aumenta, então a fração de calor transferido para a superfície da gota a qual está disponível para aumentar ainda mais a temperatura da gota diminui. À medida que a velocidade da gota diminui, o coeficiente convectivo de transferência térmica entre o ar e a gota diminui (HEYWOOD, 1988, tradução nossa).

O resultado da descrição é esquematizada na Figura 7. O tempo necessário para a evaporação de gotas de aproximadamente 25  $\mu m$  é normalmente menor que 1 *ms*, rápido em relação ao tempo total da combustão (HEYWOOD, 1988).

Figura 7 – Relação entre as propriedades de uma gota na sua evaporação



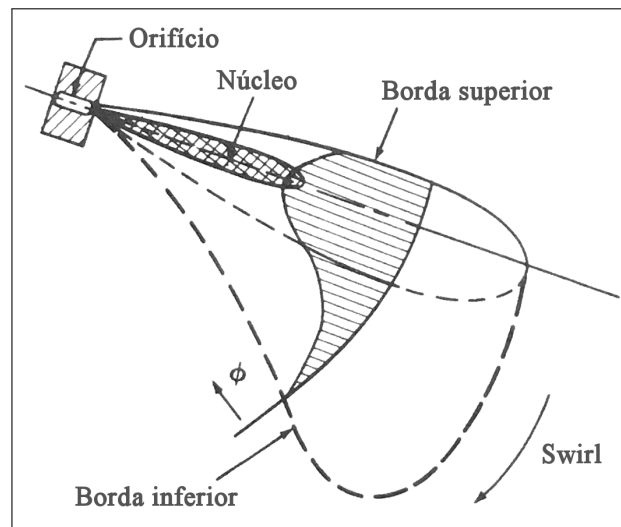
Fonte: adaptado de Heywood (1988).

### 3.2.4 Desenvolvimento do spray e mistura ar/combustível

Dependendo do projeto do motor, o choque do combustível pode ser algo desejado ou algo a ser evitado. Em superfícies frias, por exemplo, o choque resulta em misturas menos eficientes e maiores quantidades de hidrocarbonetos não queimados. Por outro lado, pouca penetração diminui a eficiência da mistura, pois o combustível fica sem acesso ao ar localizado nas bordas da câmara (HEYWOOD, 1988). Por isso, a penetração do *spray* é um parâmetro levado em consideração no projeto de um motor.

As câmaras de combustão também contam com um movimento rotacional, resultante da geometria dos dutos no cabeçote, chamado *swirl*. A Figura 8 mostra um *spray* em um ambiente com *swirl*. A estrutura do jato se torna mais complexa, a parte do *spray* que desacelera é levada pelo *swirl* e a penetração do *spray* é menor do que a de um em um ambiente sem *swirl*. É possível ver a distribuição da razão de equivalência,  $\phi$ , ao longo da estrutura.

Figura 8 – Esquema do *spray* em um ambiente com *swirl*



Fonte: adaptado de Heywood (1988).

### 3.2.5 Auto-ignição e progresso da combustão

A principal característica do motor diesel é a auto-ignição resultante dos processos descritos e das variações de pressão e temperatura da câmara de combustão. O tempo entre o início de injeção e o início da combustão é chamado atraso de ignição, sendo este o período onde as reações de pré-combustão ocorrem na mistura de ar e vapor de combustível quando ela atinge altas temperaturas e proporções próximas à estequiométrica (HEYWOOD, 1988).

A capacidade de auto-ignição do combustível é medida pelo número de cetano (CN), o qual compara a capacidade de auto-ignição de um combustível com a de uma mistura de cetano (n-hexadecano, n-C<sub>16</sub>H<sub>34</sub>) e heptametilnonano (HMN), como mostra a Equação 3.13. Como o número de cetano é majoritariamente controlado pela quantidade de n-hexadecano, com cadeia longa e alta capacidade de ignição; quanto maior o número de cetano de um combustível, maior é sua facilidade de auto-ignição.

$$\text{CN} = \text{porcentagem de n-C}_{16}\text{H}_{34} + 0,15 \cdot \text{porcentagem de HMN} \quad (3.13)$$

### 3.2.5.1 Combustão pré-misturada

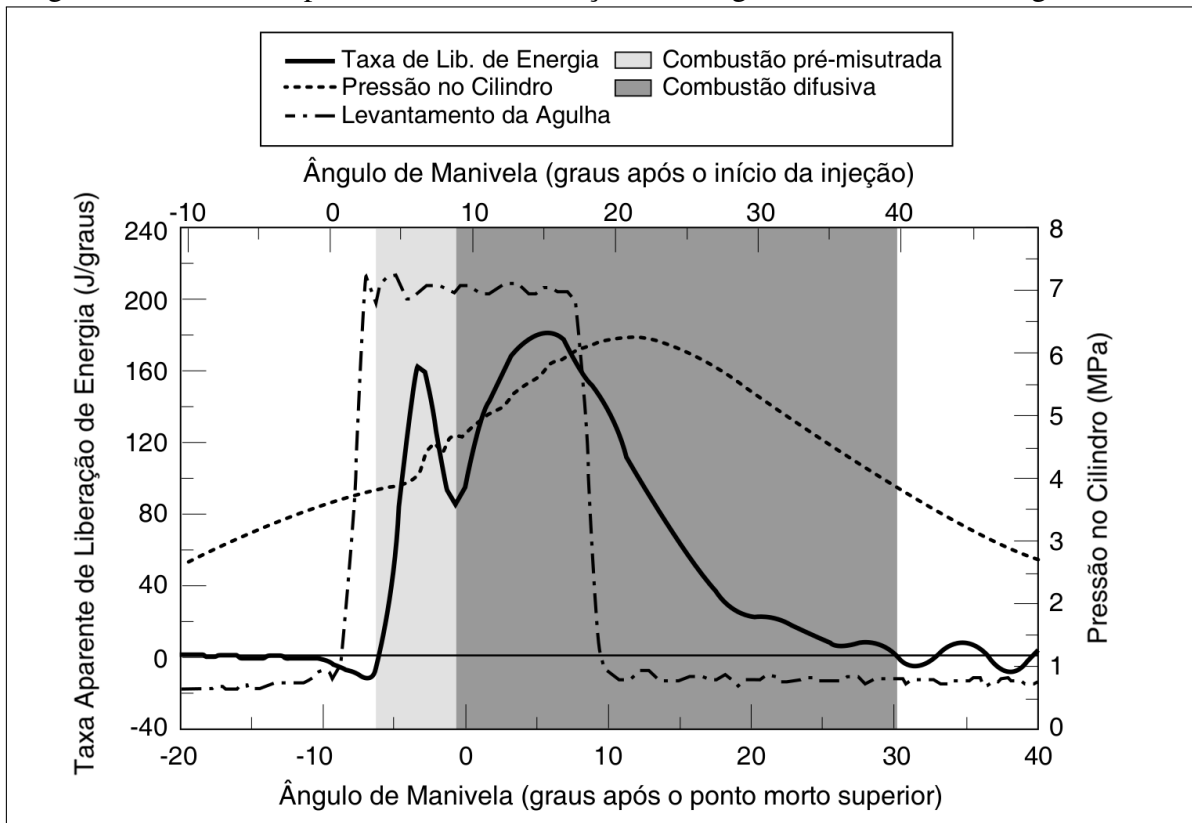
Uma vez que a ignição ocorre em regiões onde o combustível já está misturado com o ar, a primeira proporção do combustível a queimar é a evaporada, mesmo que ainda exista combustível na fase líquida e, na maioria das vezes, ainda sendo injetado. Essa fase é chamada de combustão pré-misturada, onde as reações ocorrem rapidamente, queimando o combustível evaporado em um curto espaço de tempo (HEYWOOD, 1988).

### 3.2.5.2 Combustão difusiva

O resto do combustível líquido, o aumento da temperatura e, conseqüentemente, o aumento da evaporação compõem a chamada combustão difusiva, onde a taxa de queima é controlada majoritariamente pela taxa de mistura entre o combustível evaporado e o ar, sendo responsável pela queima de mais de 75% do combustível total injetado (HEYWOOD, 1988).

A Figura 9 mostra as curvas de taxa de liberação de energia, pressão no cilindro e o levantamento da agulha do bico injetor próximo ao PMS da combustão. As duas principais fases da combustão, a pré-misturada e a difusiva, estão destacadas e o atraso de ignição é identificado pelo início da injeção (0 graus após o início da injeção) e o início da combustão pré-misturada. O início da combustão é de difícil identificação, sendo normalmente estimado pelo ponto mínimo da curva de taxa de liberação de energia, logo antes da inclinação acentuada. Heywood (1988) também inclui o período da combustão tardia, caracterizada pela cauda da curva da taxa de liberação de energia, a qual ainda há energia sendo liberada devido a resíduos de combustível não queimado.

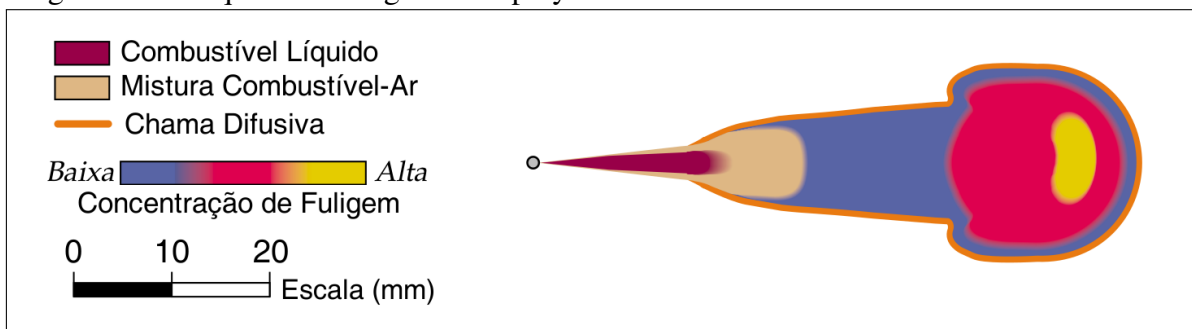
Figura 9 – Curvas de pressão, taxa de liberação de energia e levantamento da agulha



Fonte: adaptado de Dec (1997).

De acordo com Dec (1997), a Figura 10 representa a estrutura de um jato em queima desenvolvido, aproximadamente 10 graus após o início da injeção. As razões de equivalência durante todo o processo varia entre 0,5 e 6.

Figura 10 – Esquema das regiões do spray durante a fase da combustão difusiva



Fonte: adaptado de Dec (1997).

### 3.3 Simulação numérica de motores de combustão interna

Diferentes abordagens existem para diferentes aplicações da simulação numérica de motores. Stiesch (2003) distingue os modelos em três principais categorias, onde elas



se diferenciam entre si em nível de complexidade. Os modelos termodinâmicos, ou zero-dimensionais, consideram que tudo está idealmente misturado, impossibilitando a obtenção de informações sobre processos locais, mas sendo computacionalmente muito eficientes.

Em modelos fenomenológicos, ou quasi-dimensionais, o domínio é dividido em diferentes zonas, cada uma com propriedades diferentes. Essa divisão permite a previsão de fenômenos que ocorrem em regiões mais específicas. No entanto, as divisões são realizadas de forma relativamente grosseiras, além do escoamento turbulento não ser resolvido.

Já os modelos multidimensionais de Dinâmica dos Fluidos Computacional (*CFD*) também dividem o domínio, porém levando em consideração cada equação de transporte proveniente da dinâmica dos fluidos, como as equações de conservação de massa, momento e energia; além de suportar submodelos que levam a turbulência em consideração.

### 3.3.1 Resolução das Equações de Transporte

As equações de transporte podem ser resolvidas por diferentes métodos de discretização. O método das diferenças finitas, por exemplo, trabalha as diferenciais das equações de transporte com a utilização de séries de Taylor truncadas. Já o método dos volumes finitos considera que cada divisão, ou célula, é um pequeno volume de controle. Assim, as equações são integradas ao longo de seu volume, resultando em expressões algébricas que servem de aproximação do escoamento real (PATANKAR, 1980).

As principais equações de transporte resolvidas são a de conservação de massa, momento e energia, mostradas nas Equações 3.14 a 3.16, respectivamente. Nas três equações,  $t$  é o tempo,  $\rho$  é a densidade do fluido,  $u_j$  é a velocidade na direção  $j$ ,  $p$  é a pressão,  $f_j$  é a aceleração de campo na direção  $j$  (por exemplo a gravidade),  $e$  é a energia interna,  $\lambda$  é o coeficiente de condutividade térmica,  $T$  é a temperatura,  $\dot{Q}_f$  é uma fonte de calor por unidade de volume e  $(D\phi/Dt)$  é a derivada substancial de  $\phi$ , como mostrada na Equação 3.17.

A notação de Einstein foi utilizada para simplificar as equações, onde o subscrito  $i$  representa um somatório do termo considerando as três dimensões e o subscrito  $j$  é utilizado para equações que são repetidas para as três direções, como representado na Equação 3.18 para a direção  $j$ . As três dimensões são referenciadas por  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$ .

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.14)$$

$$\rho \cdot \frac{Du_j}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho \cdot f_j \quad (3.15)$$

$$\rho \cdot \frac{De}{Dt} = \frac{\partial(\lambda \cdot \nabla T)}{\partial x_i} - p \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \dot{Q}_f \quad (3.16)$$

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{D(\phi(x_1, x_2, x_3, t))}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \cdot \frac{dx_i}{dt} + \frac{\partial \phi}{\partial t} \cdot \frac{dt}{dt} = u_i \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (3.17)$$

$$\phi_{ij} = \phi_{1j} + \phi_{2j} + \phi_{3j} \quad (3.18)$$

O termo  $\tau_{ij}$  da conservação de momento, Equação 3.15, é componente do tensor de tensões viscosas, o qual leva em consideração a transferência de momento devido à fricção, mostrado na Equação 3.19. Para fluidos newtonianos, ele pode ser representado pela Equação 3.20, onde  $\mu$  é a viscosidade e  $\delta_{i,j}$  é o delta de Kronecker, o qual é 0 se  $i \neq j$  e 1 se  $i = j$ .

$$T_\tau = \begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

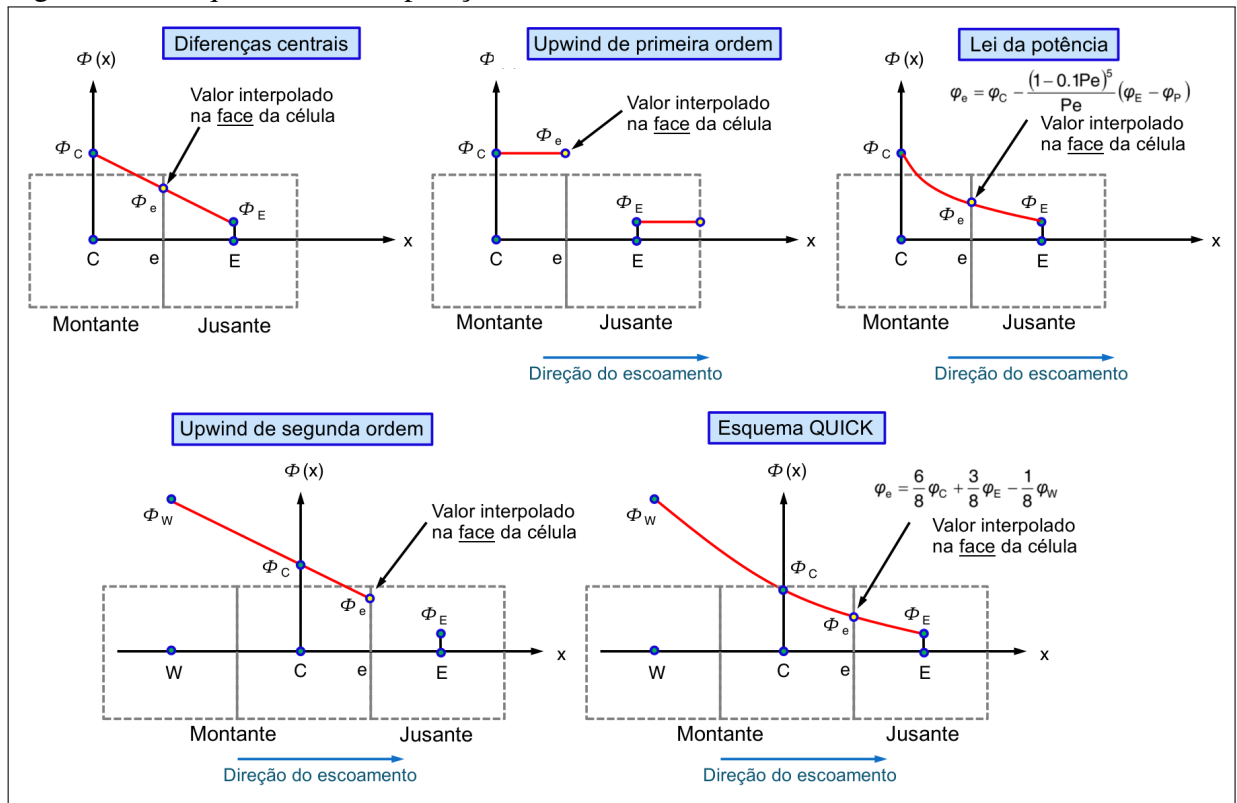
$$\tau_{ij} = \mu \cdot \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \delta_{ij} \cdot \frac{2}{3} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (3.20)$$

As propriedades de cada célula são frequentemente associadas à uma posição específica da célula. No entanto, a utilização dos métodos de discretização exige o valor das propriedades em locais diferentes dos locais onde as propriedades estão associadas. Um exemplo deste caso é quando as propriedades estão associadas ao centro da célula, porém um dos termos da equação de transporte exige os valores da propriedade em duas faces opostas da célula. Para a obtenção desses valores, esquemas de interpolação são utilizados. A Figura 11 mostra a abordagem de alguns desses esquemas.  $Pe$  é o número de Peclet, a razão entre o transporte convectivo pelo difusivo.

### 3.3.2 Turbulência

O número de Reynolds,  $Re$ , representa uma relação entre a relevância dos efeitos viscosos, os quais tendem a desacelerar o escoamento, em frente aos efeitos inerciais devido ao escoamento em si, como mostrado na Equação 3.21, onde  $L$  é um comprimento característico do escoamento. Se seu valor for alto, significa que a velocidade do fluido resulta em um efeito inercial que é pouco influenciado pela viscosidade. Se ele for baixo, a viscosidade previne um aumento descontrolado da velocidade. Por isso, ele é utilizado para diferenciar os escoamentos

Figura 11 – Esquemas de interpolação comumente utilizados



Fonte: adaptado de Gilkeson (2015).

em duas categorias: laminar e turbulento. Os laminares são escoamentos organizados e com baixo número de Reynolds. Os turbulentos apresentam comportamentos desorganizados, tipicamente de um fluido o qual não está sendo freado pela viscosidade. Escoamentos são considerados turbulentos quando  $Re$  ultrapassa 2500 em escoamentos confinados e  $5 \cdot 10^5$  em escoamentos abertos.

$$Re = \frac{\rho \cdot u \cdot L}{\mu} \quad (3.21)$$

### 3.3.2.1 O fenômeno da turbulência

Os escoamentos encontrado na engenharia são, em sua maioria, turbulentos. Especialmente em escoamentos reativos, a existência de turbulência é, inclusive, muitas vezes algo necessário, como por exemplo nos motores de combustão interna, onde a falta de turbulência poderia inclusive impedir a ignição do combustível (GLASSMAN *et al.*, 2015). Sua importância está na sua alta capacidade de mistura devido aos movimentos rotacionais dos vórtices turbulentos. Tais vórtices existem em diversos tamanhos, onde os maiores são grandes o suficiente para serem influenciados de forma significativa pelo escoamento médio. Eles então absorvem essa energia e repassam para os menores, os quais dissipam energia e passam para os ainda

menores até o menor vórtice turbulento, que dissipa toda a energia por efeitos viscosos. Esse comportamento é conhecido como cascata de energia, originalmente descrito por Kolmogorov (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). A ordem de grandeza dos menores vórtices turbulentos é chamada escala de Kolmogorov e seu tamanho tem relação com o número de Reynolds do escoamento.

Uma característica visível de escoamentos turbulentos é a aleatoriedade dos valores exatos das propriedades. Seus valores tendem a flutuar ao redor de uma média, como mostrado pela Figura 12. Por isso, é comum se utilizar a decomposição de Reynolds para tratar com as propriedades em escoamentos turbulentos, a qual divide o valor em dois termos, como pode ser visto na Equação 3.22. A barra superior indica que o parâmetro é uma média temporal, como mostra a Equação 3.23, enquanto o apóstrofo denota o termo flutuante. O termo  $\Delta t$  deve ser grande o suficiente, para ser uma boa média das flutuações, ao mesmo tempo em que deve ser pequeno o suficiente para conseguir identificar as variações de um regime não estacionário.

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (3.22)$$

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \cdot \int_t^{t+\Delta t} \phi \cdot dt \quad (3.23)$$

Análoga à decomposição de Reynolds, a média de Favre pondera os valores por massa, mostrada nas Equações 3.24 e 3.25. Ela é utilizada em todas as propriedades, exceto densidade e pressão. Sua utilização pode simplificar casos em que a aplicação da decomposição de Reynolds exigiria modelagens extras (BAUMGARTEN, 2006).

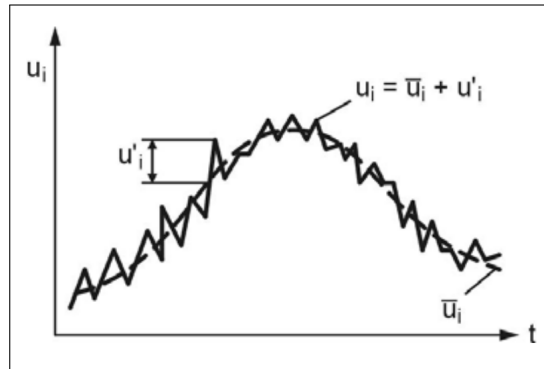
$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (3.24)$$

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho \cdot \phi}}{\bar{\rho}} \quad (3.25)$$

### 3.3.2.2 Abordagens

As Equações 3.14 a 3.16 não estão limitadas para escoamentos laminares, basta dividir o domínio da mesma forma e utilizar um método de resolução das equações. No entanto, essa abordagem, chamada Simulação Numérica Direta, ou *Direct Numerical Simulation (DNS)*, apesar de ser conceitualmente simples, sofre fortemente com a limitação da capacidade de

Figura 12 – Exemplo da velocidade de um escoamento turbulento transiente



Fonte: Baumgarten (2006).

processamento dos computadores atuais. Isto é, em sua maioria, devido ao requerimento de redução extrema das células, uma vez que elas devem ser capazes de descrever os acontecimentos que ocorrem em pequenas regiões, como os vórtices turbulentos da escala de Kolmogorov. Além da divisão refinada do espaço, o tempo também deve ser dividido em passos muito pequenos. Por isso, o *DNS* é usado apenas para escoamentos com baixos números de Reynolds. A Simulação dos Grandes Vórtices, ou *Large Eddy Simulation (LES)*, diferencia os vórtices em grandes e pequenos, onde os grandes são simulados numericamente, como o *DNS*, e os pequenos são modelados (BAUMGARTEN, 2006).

A abordagem mais encontrada em simulações de *CFD* é a da utilização das equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds (*RANS*). Um dos dois tipos de média temporais apresentadas pelas Equações 3.22 a 3.25 é aplicado nos dois lados das equações de transporte. Essa abordagem é computacionalmente eficiente, pois as informações sobre as flutuações são perdidas na aplicação da média, avaliando apenas a influência da turbulência no escoamento médio. Dessa forma, é possível trabalhar com malhas com células que não sejam do tamanho dos vórtices turbulentos (BAUMGARTEN, 2006).

### 3.3.2.3 Equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds (*RANS*)

Substituindo as propriedades pela decomposição apresentada pela Equação 3.24 e aplicando a média de Favre na equação de transporte da conservação de momento, como mostrado na Equação 3.26, a Equação 3.27 é obtida. A aplicação da média de Reynolds, como sugere o nome do método, resulta em uma equação similar à Equação 3.27 quando o escoamento é incompressível. Em escoamentos compressíveis, no entanto, surgem termos como  $\overline{\rho' \cdot u'_i}$ , os

quais precisam ser modelados. A utilização da média de Favre contorna esse problema.

$$\overline{(\bar{\rho} + \rho') \cdot \frac{D(\tilde{u}_j + u_j'')}{Dt}} = -\frac{\partial(\bar{p} + p')}{\partial x_j} + \frac{\partial(\tilde{\tau}_{ij} + \tau_{ij}'')}{\partial x_i} + (\bar{\rho} + \rho') \cdot f_j \quad (3.26)$$

$$\rho \cdot \frac{D\tilde{u}_j}{Dt} = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \tilde{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \cdot \widetilde{u_i'' \cdot u_j''} \right) + \bar{\rho} \cdot f_j \quad (3.27)$$

Com exceção do segundo termo dentro dos parênteses, a Equação 3.27 é similar à Equação 3.15. O termo extra é chamado de tensão de Reynolds, o qual não é uma tensão de fato, mas representa a contribuição da flutuação da velocidade com um efeito inercial causado pela variação do momento linear. O novo tensor é uma matriz simétrica 9x9 com a mesma estrutura da Equação 3.19, adicionando 6 novas variáveis. Por isso, o aparecimento das tensões de Reynolds implica na existência de mais variáveis a serem encontradas do que número de equações disponíveis, impossibilitando o fechamento matemático.

Uma solução é a utilização da hipótese de Boussinesq, a qual considera que as tensões de Reynolds podem ser expressas de forma análoga às tensões viscosas através da utilização de uma viscosidade turbulenta  $\mu_t$ , como mostra a Equação 3.28 (BAUMGARTEN, 2006). O termo  $k$  é a energia cinética turbulenta e é composta pela Equação 3.29, sendo a energia cinética resultante da flutuação da velocidade por unidade de massa.

$$\tilde{\tau}_{i,j,t} = -\bar{\rho} \cdot \widetilde{u_i'' \cdot u_j''} = \mu_t \cdot \left( \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \delta_{ij} \cdot \frac{2}{3} \bar{\rho} \cdot k \quad (3.28)$$

$$k = \frac{1}{2} \cdot \left( \widetilde{u_1'' \cdot u_1''} + \widetilde{u_2'' \cdot u_2''} + \widetilde{u_3'' \cdot u_3''} \right) \quad (3.29)$$

A viscosidade turbulenta não é uma propriedade do fluido, mas um parâmetro que é calculado, juntamente com a energia cinética turbulenta.

Como ainda existem duas variáveis a mais que equações,  $\mu_t$  e  $k$ , modelos de turbulência são utilizados. Existem diversos modelos diferentes de turbulência, os quais se diferenciam entre si pela quantidade extra de equações de transporte (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

### 3.3.2.4 Modelo de Turbulência $k-\varepsilon$

Muitos estudos utilizam o modelo proposto por Launder e Spalding (1974), o qual relaciona a viscosidade turbulenta com uma escala de comprimento  $l$  e uma velocidade  $q$

características, de acordo com a Equação 3.30. O modelo utiliza a característica do fenômeno da cascata de energia para relacionar a dissipação da energia cinética turbulenta,  $\varepsilon$ , com a escala de comprimento característica (BAUMGARTEN, 2006), uma vez que a dissipação viscosa ocorre predominantemente nos menores vórtices. Essa relação é apresentada pela Equação 3.31, a qual deixa clara a relação inversa entre a dissipação e o comprimento.

$$\mu_t = C_\mu \cdot \bar{\rho} \cdot l \cdot q \quad (3.30)$$

$$\varepsilon \approx \frac{k^{3/2}}{l} \quad (3.31)$$

O modelo considera que a escala de velocidade característica é equivalente à raiz quadrada da energia cinética turbulenta,  $k$ . Dessa forma, a viscosidade turbulenta é representada pela Equação 3.32.

$$\mu_t = C_\mu \cdot \bar{\rho} \cdot \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.32)$$

Esse modelo utiliza duas equações de transporte extras para o fechamento matemático, uma para  $k$  e outra para  $\varepsilon$ , respectivamente mostradas nas Equações 3.33 e 3.34. Os valores recomendados para  $C_k$ ,  $C_\varepsilon$ ,  $C_1$ ,  $C_2$  e  $C_\mu$  são mostrados na Tabela 3 (LAUNDER; SPALDING, 1974).

$$\bar{\rho} \cdot \frac{Dk}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_k} \cdot \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + \mu_t \cdot \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \cdot \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \bar{\rho} \cdot \varepsilon \quad (3.33)$$

$$\bar{\rho} \cdot \frac{D\varepsilon}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + C_1 \cdot \mu_t \cdot \frac{\varepsilon}{k} \cdot \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \cdot \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \bar{\rho} \cdot C_2 \cdot \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.34)$$

Tabela 3 – Valores recomendados para o modelo  $k - \varepsilon$

$C_\mu$	$C_1$	$C_2$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$
0,09	1,44	1,92	1,0	1,3

Fonte: Launder e Spalding (1974).

### 3.3.3 Injeção de combustível

Em modelos multidimensionais com injeção direta de combustível, o trajeto das gotas é previsto através de uma descrição Lagrangiana, onde um conjunto de gotas com propriedades

iguais é uma partícula que se move de forma contínua no domínio. Os processos que ocorrem na gota desde o momento de sua injeção então são modelados e aplicados a cada um das parcelas. Cada um dos processos, como *breakup*, arrasto, evaporação, colisão e choque contra a parede; são modelados separadamente.

### 3.3.3.1 Quebra das gotas

As regiões primária e secundária de *breakup* mostradas na Figura 4 são processos relevantes para a formação da mistura ar-combustível, exigindo maior detalhamento das grandes gotas perto do injetor e das menores na região de quebra secundária. Ainda que as simulações mais completas simulem também o escoamento interno do bico injetor, a fim de utilizar condições iniciais do jato mais precisas, modelos com grande variedade de complexidade foram propostos para as duas regiões de quebra com resultados satisfatórios (BAUMGARTEN, 2006).

Dentre os modelos de quebra primária utilizados, o modelo *Blob* considera que a quebra primária é um processo que pode ser substituído pela injeção de gotas grandes, inclusive maiores que as do caso real, deixando-as sujeitas ao mecanismo de quebra secundária. Esse modelo é atrativo pelo baixo número de entradas requeridas.

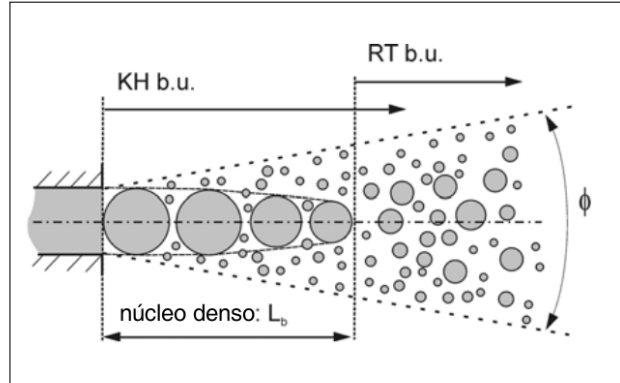
Existem também diferentes modelos para a quebra secundária. O modelo Taylor Analogy Breakup (*TAB*), por exemplo, considera que a gota se comporta analogamente a um sistema massa-mola, onde a força de restauração seria a força devido à tensão superficial e o amortecimento seria devido à viscosidade do fluido. O modelo de Rayleigh-Taylor leva em consideração as observações que indicam que pequenas perturbações causam oscilações na estrutura das gotas até elas atingirem um comprimento de onda ótimo onde a gota se divide em menores. Já o modelo de Kelvin-Helmoltz se baseia nas instabilidades da superfície das gotas, levando em consideração a possibilidade de desprendimento de gotas menores a partir de uma maior, onde as menores têm diâmetro da ordem do comprimento de onda da instabilidade (BAUMGARTEN, 2006).

Modelos que são utilizados nas duas regiões são os considerados modelos combinados. Um deles é a junção de três citados, onde as gotas são injetadas com o diâmetro do orifício, como o *Blob*, as quais podem então quebrar tanto pelo modelo de Rayleigh-Taylor quanto pelo de Kelvin-Helmoltz, onde o primeiro método que prever a quebra de uma gota específica é o método escolhido para a quebra dessa gota. Esse modelo é conhecido como modelo *Blob-KH-RT*. É comum permitir a possibilidade de quebra pelo modelo de Rayleigh-Taylor apenas após uma



certa distância do ponto de injeção, para evitar quebras muito rápidas logo no início do *spray* (BAUMGARTEN, 2006). A Figura 13 mostra um esquema da utilização dos três modelos em conjunto.

Figura 13 – Modelo combinado *blob-KH-RT*



Fonte: adaptado de Baumgarten (2006).

### 3.3.3.2 Efeito do arrasto

A desaceleração causada pela velocidade relativa entre a gota e o ar pode ser tratada considerando ou não a deformação da gota (BAUMGARTEN, 2006). Para uma gota esférica que não se deforma, a força de arrasto pode ser encontrada pela Equação 3.35, onde  $C_{D,esf}$  é o coeficiente de arrasto da gota esférica e  $A_f$  é a área frontal.  $C_{D,esf}$  é calculado pela Equação 3.36, onde o número de Reynolds  $Re_g$  é calculado pela Equação 3.37 e  $\mu_g$  é a viscosidade do gás.

$$F_{arrasto} = \frac{\rho_g}{2} \cdot u_{rel}^2 \cdot C_{D,esf} = \rho_l \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3 \cdot \frac{d^2x}{dt^2} \quad (3.35)$$

$$C_{D,esf} = \begin{cases} \frac{24}{Re_g} \cdot \left(1 + \frac{Re_g^{2/3}}{6}\right) & \text{se } Re_g \leq 1000 \\ 0,424 & \text{se } Re_g > 1000 \end{cases} \quad (3.36)$$

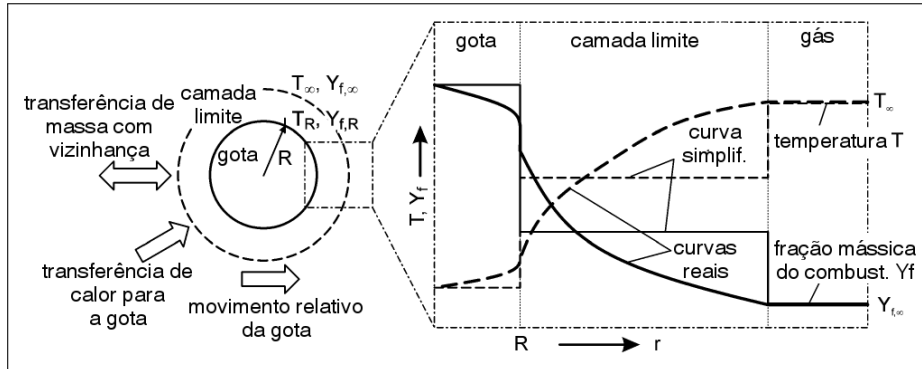
$$Re_g = \frac{2 \cdot r \cdot u_{rel}}{\mu_g} \quad (3.37)$$

### 3.3.3.3 Evaporação

Como diferentes substâncias têm diferentes propriedades de evaporação, eles evaporam em velocidades diferentes quando em uma mistura, alterando a proporção da mistura ao longo da evaporação. Gotas de combustíveis multi-componentes, como é o caso do diesel,

pode ter sua evaporação calculada considerando esse aspecto. No entanto, é comum considerar que a evaporação das gotas ocorrem como se o combustível fosse composto por apenas um componente (BAUMGARTEN, 2006). A Figura 14 mostra um esquema da evaporação.

Figura 14 – Visualização esquemática da evaporação da gota

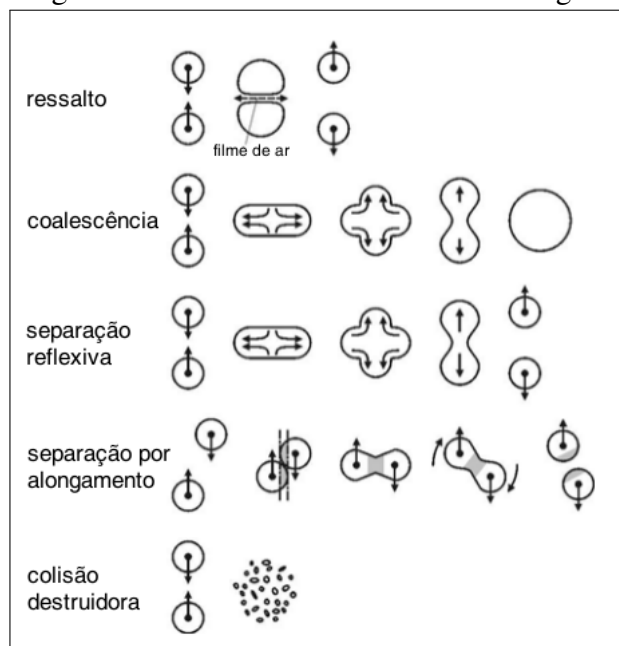


Fonte: adaptado de Baumgarten (2006).

### 3.3.3.4 Colisão entre gotas

A Figura 15 mostra diferentes mecanismos de colisão entre gotas. Modelos de colisão, no entanto, não levam em consideração todos os mecanismos. O modelo proposto por O'Rourke, por exemplo, considera apenas dois resultados para a colisão: coalescência, onde as duas se juntam para formar uma maior; ou junção momentânea procedida por separação (BAUMGARTEN, 2006).

Figura 15 – Mecanismos de colisão entre gotas.

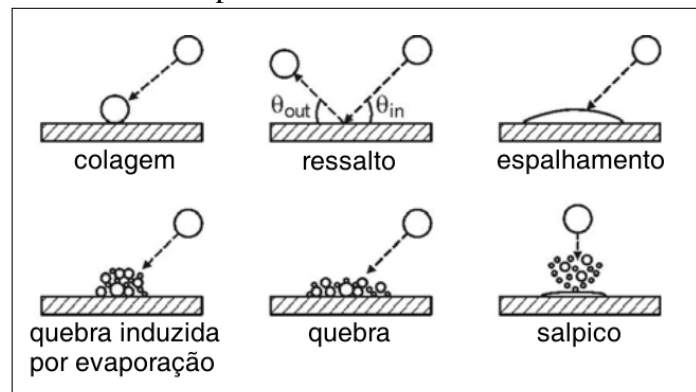


Fonte: adaptado de Baumgarten (2006).

### 3.3.3.5 Choque contra a parede

Uma descrição adequada do choque do *spray* contra a parede é essencial em simulações de motores com injeção direta, uma vez que os filmes de líquidos formados pela colisão evaporam de maneira diferente das gotas que estão no ar. A Figura 16 mostra diferentes mecanismos de choque contra a parede. Baumgarten (2006) discute sobre vários modelos propostos para a previsão correta do comportamento do líquido que se choca contra a parede, os quais podem ter níveis de complexidade variados. Um dos primeiros modelos propostos, por exemplo, considera apenas três resultados da colisão: adesão da gota, o ricochete e o deslizamento.

Figura 16 – Ilustração esquemática dos regimes de impacto.



Fonte: adaptado de Baumgarten (2006).

### 3.3.4 Auto-ignição e progresso da combustão

A simulação de um ciclo de um motor diesel depende inteiramente do acontecimento da auto-ignição da mistura ar-combustível. A modelagem do processo de ignição procura emular a formação dos radicais que culminam na queima por uma simplificação do processo químico. Normalmente, nas simulações, o modelo de auto-ignição é usado apenas durante o período do atraso de ignição, mudando a abordagem química após a região ultrapassar uma temperatura que indica que a queima teve início (STIESCH, 2003).

O modelo mais simplificado de auto-ignição é o mecanismo de passo único, o qual utiliza apenas uma equação com a estrutura de uma equação de Arrhenius, utilizada em cálculos de cinética química, para estimar o atraso de ignição. Outro método muito utilizado é o modelo Shell, o qual simula o mecanismo de formação dos radicais em 8 reações, sendo provavelmente o modelo simplificado mais utilizado em estudos (STIESCH, 2003).

Com o aumento da capacidade de processamento dos computadores, a possibilidade de abandonar a utilização de modelos de auto-ignição e utilizar mecanismos de cinética química complexa se tornou cada vez mais viável. Estudos realizados com cinética química complexa mostraram que tal detalhamento não traz benefícios apenas para o período do atraso de ignição, mas também permite ter informações mais específicas sobre o progresso da combustão e da formação de poluentes (TAO *et al.*, 2000). A tendência é o crescimento de análises numéricas de motores utilizando cinética química complexa, o que pode ser evidenciado pelo surgimento de adaptações de modelos clássicos de combustão em ambiente turbulento, os quais utilizavam poucas ou apenas uma reação, para suportar cinética química detalhada (ZHOU *et al.*, 2017).

### 3.4 Cinética química da combustão

A combustão é resultado de reações químicas que ocorrem quando o combustível está molecularmente misturado com o ar após a absorção suficiente de energia para a ignição. Em muitos casos as conversões ocorrem de forma rápida o suficiente a ponto de serem consideradas explosivas, permitindo o estudo do progresso da combustão como sendo apenas uma reação global infinitamente rápida sem perda de sentido físico. A necessidade de um estudo onde as reações não ocorram rapidamente surge com a exigência de uma boa descrição das composições dos produtos, uma vez que alguns poluentes são formados em reações com velocidades mais lentas, normalmente a baixas temperaturas (GLASSMAN *et al.*, 2015).

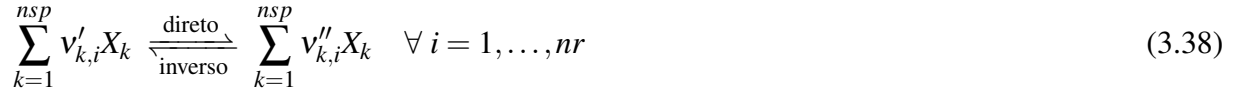
A descrição do progresso químico é fornecida pelo mecanismo de reações. Mecanismos simplificados omitem informações a respeito do progresso, enquanto os complexos o descrevem detalhadamente. No caso da combustão, a complexidade de um mecanismo detalhado está ligado diretamente com a complexidade das cadeias químicas que compõem o combustível (GLASSMAN *et al.*, 2015).

Como esses mecanismos são utilizados em simulações numéricas, os que têm grandes números de espécies podem inviabilizar a simulação, além de terem várias escalas de tempo de diferentes ordens de grandeza para diferentes espécies, tornando o sistema de Equação Diferencial Ordinária (EDO) rígido e necessitando passos de tempo inviavelmente pequenos, dificultando a integração (LU; LAW, 2009).

A fim de mitigar esse problema, análises de sensibilidade e hipóteses são utilizadas para gerarem mecanismos reduzidos e menos rígidos, procurando manter as mesmas características significantes do combustível, como o atraso de ignição.

### 3.4.1 Modelo de Arrhenius

Uma reação segue o formato mostrado na Equação 3.38, onde  $v'_{k,i}$  e  $v''_{k,i}$  são os coeficientes estequiométricos da espécie  $k$  da reação  $i$ ,  $X_k$  corresponde 1 mol da espécie  $k$  e  $nsp$  e  $nr$  são o número total de espécies e reações, respectivamente.



As velocidades das reações são encontradas pela Lei de Arrhenius, a qual as relacionam com as concentrações das espécies e a temperatura utilizando a Equação 3.39, onde  $c_k$  é a concentração molar da espécie química  $k$ ,  $T$  é a temperatura local e  $q_i$  é a taxa de progresso da reação  $i$ . Para uma reação elementar,  $q_i$  pode ser calculado utilizando a Equação 3.40, onde  $k_{dir,i}$  e  $k_{inv,i}$  são as constantes de velocidade do sentido direto e inverso de da reação  $i$ , respectivamente (KEE *et al.*, 1989).

$$\dot{\omega}_k(c, T) = \sum_{i=1}^{nr} (v''_{k,i} - v'_{k,i}) \cdot q_i(c, T) \quad (3.39)$$

$$q_i(c, T) = k_{dir,i}(T) \cdot \prod_{k=1}^{nsp} c_k^{v'_{k,i}} + k_{inv,i}(T) \cdot \prod_{k=1}^{nsp} c_k^{v''_{k,i}} \quad (3.40)$$

$\dot{\omega}_k$  também pode ser considerado como a taxa de geração da espécie menos a taxa de destruição através da manipulação das Equações 3.39 e 3.40, como mostrado pelas Equações 3.41 a 3.43.

$$\dot{\omega}_k = \sum_{i=1}^{nr} (g\dot{e}r_{k,i} - d\dot{e}s_{k,i}) \quad (3.41)$$

$$g\dot{e}r_{k,i} = v''_{k,i} \cdot k_{dir,i}(T) \cdot \prod_{k=1}^{nsp} c_k^{v'_{k,i}} + v'_{k,i} \cdot k_{inv,i}(T) \cdot \prod_{k=1}^{nsp} c_k^{v''_{k,i}} \quad (3.42)$$

$$d\dot{e}s_{k,i} = v'_{k,i} \cdot k_{dir,i}(T) \cdot \prod_{k=1}^{nsp} c_k^{v'_{k,i}} + v''_{k,i} \cdot k_{inv,i}(T) \cdot \prod_{k=1}^{nsp} c_k^{v''_{k,i}} \quad (3.43)$$

A constante de velocidade do sentido direto é encontrada utilizando os coeficientes de Arrhenius mostrados na Equação 3.44, onde  $A_i$  é o coeficiente pré-exponencial,  $\beta_i$  é o expoente da temperatura e  $E_i$  é a energia de ativação, todos da reação  $i$ , e  $R$  é a constante universal dos gases ideais.

$$k_{dir,i} = A_i \cdot T^{\beta_i} \cdot \exp\left(\frac{E_i}{R \cdot T}\right) \quad (3.44)$$

A constante de velocidade do sentido inverso pode ser relacionada com a do sentido direto através da constante de equilíbrio  $K_{c,i}$  como mostrado na Equação 3.45, apesar de também ser possível encontrar reações com os coeficientes mostrados na Equação 3.44 também para o sentido inverso. O valor da constante de equilíbrio da reação  $i$  pode ser encontrado através da Equação 3.46, onde  $P_{atm}$  é a pressão atmosférica e  $H_k^\circ$  e  $S_k^\circ$  são a entalpia e a entropia total da espécie  $k$ , respectivamente (KEE *et al.*, 1989).

$$K_{c,i} = \frac{k_{dir,i}}{k_{inv,i}} \quad (3.45)$$

$$K_{c,i} = \left( \frac{P_{atm}}{R \cdot T} \right)^{\sum_{k=1}^{nsp} \nu_{k,i}} \cdot \exp \left[ \sum_{k=1}^{nsp} \nu_{k,i} \cdot \left( \frac{S_k^\circ(T)}{R} - \frac{H_k^\circ(T)}{R \cdot T} \right) \right] \quad (3.46)$$

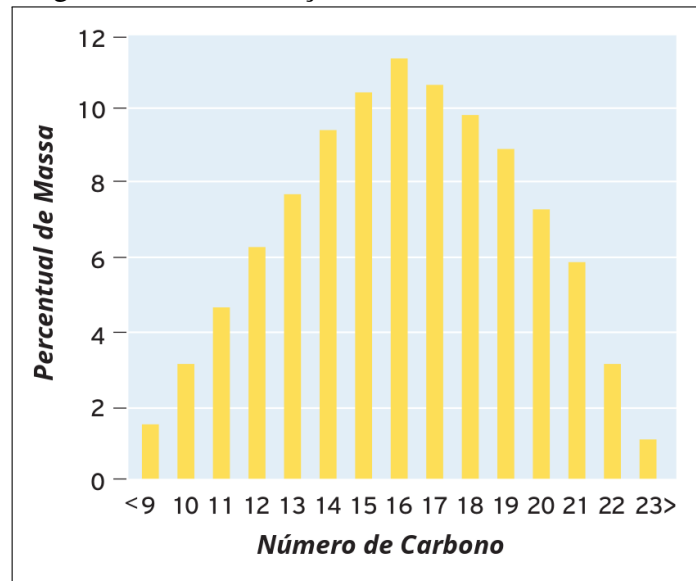
É comum encontrar reações que não se comportam da mesma forma que as reações elementares apresentadas, como as de terceiro corpo, as dependentes da pressão e as que usam as expressões de Landau-Teller, em vez de usarem as de Arrhenius (KEE *et al.*, 1989).

### 3.4.2 Reações de cinética química do diesel

Os combustíveis derivados do refino do petróleo são formados por diferentes classes de hidrocarbonetos, como os alcanos de cadeia normal, os isoalcanos, os cicloalcanos e os aromáticos; resultando em uma composição complexa de milhares de componentes (MUELLER *et al.*, 2016). Cada classe tem diferentes propriedades, com números de cetano que variam entre 10 e 80 para isoalcanos, entre 40 e 70 para cicloalcanos e 0 a 60 para aromáticos. Como o tamanho das cadeias está diretamente relacionado com o número de cetano, os alcanos com cadeia normal apresentam altos valores, os quais aumentam com a massa molar. A Figura 17 mostra um exemplo de distribuição de componentes com diferentes números de carbono para o Diesel. Diferentes proporções das três classes de hidrocarbonetos citadas é um dos fatores para se ter propriedades diferentes entre dois tipos de diesel (CHEVRON GLOBAL MARKETING, 2007).

Os mecanismos criados para os estudos com esses combustíveis não levam em consideração as composições reais – uma mistura de componentes representativos é utilizada como substituto do combustível, simplificando o estudo e preservando suas características mais importantes (PEI *et al.*, 2015). No entanto, embora eles sejam uma simplificação, os mecanismos para os substitutos podem ser grande o suficiente para precisarem de redução.

Figura 17 – Distribuição de carbono no Diesel



Fonte: adaptado de Chevron Global Marketing (2007).

Diferentes misturas foram estudadas para o substituto do diesel, alguns discutidos por Eliseo *et al.* (2014), os quais contém misturas em base molar com alcanos de cadeia normal, como o n-heptano e o n-dodecano, além de espécies da classe dos aromáticos, como o tolueno e o xileno (PEI *et al.*, 2015).

### 3.5 O problema da combustão em ambiente turbulento

Quando reações químicas são levadas em consideração em um estudo utilizando *CFD*, surge a necessidade de tratar cada uma das espécies existentes no problema individualmente, uma vez que suas concentrações locais influenciam nas taxas de progresso das reações (GLASSMAN *et al.*, 2015). A equação de transporte utilizada para prever o comportamento da espécie  $k$  é representada pela Equação 3.47, onde  $Y_k$  é a fração mássica,  $D_k$  é o coeficiente de difusividade e  $\dot{\omega}_k$  é a taxa de variação da concentração, todos específicos da espécie  $k$ . A Equação 3.14, inclusive, é o somatório da Equação 3.47 considerando todas as espécies.

$$\frac{\partial (\rho \cdot Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \cdot u_j \cdot Y_k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho \cdot D_k \cdot \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_k \quad (3.47)$$

Utilizando a mesma abordagem do *RANS* e aplicando a média de Favre na Equação 3.47, a Equação 3.48 é obtida (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). A dificuldade da implementação dessa equação de transporte se deve pela média de Favre da taxa de variação de concentração da espécie  $k$ ,  $\tilde{\omega}_k$ , a qual, devido a sua alta não-linearidade, não pode ser facilmente

expressa pelas médias das concentrações e temperatura.

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \cdot \tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \cdot \tilde{u}_j \cdot \tilde{Y}_k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \cdot \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\rho} \cdot D_k \cdot \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \right) + \tilde{\omega}_k \quad (3.48)$$

### 3.5.1 Avaliação matemática do problema

Borghi (1978) avaliou a utilização de uma análise direta da combustão turbulenta simplificada por uma única reação irreversível mostrada na Equação 3.49, onde  $C$  é a quantidade de combustível,  $O$  é a de oxidante e  $P$  é a de produtos gerados. Para a análise, a Equação 3.44 foi adaptada para a formação da Equação 3.50, onde  $T_A$  é a temperatura de ativação,  $(E_A/R)$ ; para o cálculo do consumo do combustível  $\dot{\omega}_C$

$$C + afs \cdot O \rightarrow (1 + afs) \cdot P \quad (3.49)$$

$$\dot{\omega}_C = -A \cdot \rho^2 \cdot T^\beta \cdot Y_C \cdot Y_O \cdot \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right) \quad (3.50)$$

A análise direta se baseia na aplicação da série de Taylor na Equação 3.50. Na Equação 3.51,  $P$  e  $Q$  são definidos pelas Equações Equação 3.52 e Equação 3.53. A dificuldade apresentada pela Equação 3.51 se deve pela necessidade de encontrar equações para os termos  $\widetilde{Y''_k \cdot T''^n}$  para o fechamento do sistema de equações. Esse problema é ainda intensificado devido à alta não-linearidade de  $\dot{\omega}_C$  em função das concentrações e da temperatura, o que exige que a série não possa ser truncada com poucos termos sem grandes erros.

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_C = & -A \cdot \bar{\rho}^2 \cdot \tilde{T}^\beta \cdot \tilde{Y}_C \cdot \tilde{Y}_O \cdot \exp\left(-\frac{T_A}{\tilde{T}}\right) \times \left[ 1 + \frac{\widetilde{Y''_C \cdot Y''_O}}{\tilde{Y}_C \cdot \tilde{Y}_O} + (P_1 + Q_1) \cdot \left( \frac{\widetilde{Y''_C \cdot T''}}{\tilde{Y}_C \cdot \tilde{T}} + \frac{\widetilde{Y''_O \cdot T''}}{\tilde{Y}_O \cdot \tilde{T}} \right) \right. \\ & \left. + (P_2 + Q_2 + P_1 \cdot Q_1) \cdot \left( \frac{\widetilde{Y''_C \cdot T''^2}}{\tilde{Y}_C \cdot \tilde{T}^2} + \frac{\widetilde{Y''_O \cdot T''^2}}{\tilde{Y}_O \cdot \tilde{T}^2} \right) + \dots \right] \end{aligned} \quad (3.51)$$

$$P_n = \sum_{k=1}^n (-1)^{n-k} \cdot \frac{(n-1)!}{(n-k)! \cdot [(k-1)!]^2 \cdot k} \cdot \left( \frac{T_A}{\tilde{T}} \right)^k \quad (3.52)$$

$$Q_n = \frac{\beta \cdot (\beta + 1) \cdot \dots \cdot (\beta + n - 1)}{n!} \quad (3.53)$$



Mesmo que todas as dificuldades apresentadas pela Equação 3.51 fossem resolvidas, ela prevê o consumo do combustível em um caso muito simplificado onde apenas uma reação irreversível é considerada, impedindo a utilização de um modelo de cinética química complexa e afetando a previsão de fenômenos dependentes dessa complexidade, como por exemplo a auto-ignição do combustível. Devido a esses empecilhos, tal abordagem não é utilizada quando se estuda a combustão em regimes turbulentos.

### 3.5.2 Avaliação experimental do problema

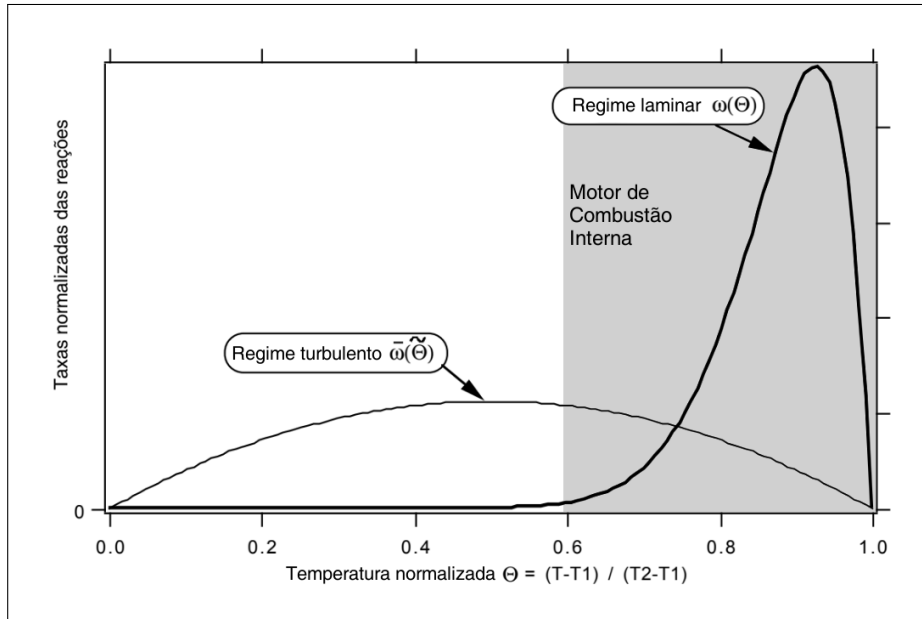
Spalding (1971) estudou a significância da turbulência em escoamentos reativos e observou que o efeito do escoamento turbulento resulta em um controle das taxas predominantemente pelas características aerodinâmicas do escoamento (ARTEMOV *et al.*, 2009). De fato, ao comparar dados experimentais com a hipótese de que a turbulência não tem grande influência, os valores previstos e os experimentais são discrepantes.

Poinsot e Veynante (2005) apresenta um gráfico das taxas das reações em função da temperatura normalizada pela temperatura final da combustão  $\Theta$ , mostrado na Figura 18. É possível observar que, para a faixa de temperatura com as maiores taxas em um regime laminar, o escoamento turbulento tem valores de taxas mais baixos. Em compensação, as conversões ocorrem ao longo de uma faixa mais abrangente de temperatura do que em um regime laminar. Uma região foi adicionada ao gráfico para representar a faixa de temperatura a partir da ignição em um motor diesel. Ela deixa clara que, em motores de combustão interna, os progressos das reações tendem a ser menores que no caso laminar. Isso não indica, no entanto, que a queima em um escoamento laminar é mais rápido, uma vez que a alta eficiência de mistura devido à turbulência gera uma mistura de ar e vapor de combustível muito mais propensa à auto-ignição.

Um número adimensional utilizado para avaliar a relevância da turbulência nos progressos das reações é o número de Damköhler,  $Da$ , mostrado na Equação 3.54,  $\tau_t$  é uma escala de tempo relacionada à mistura turbulenta e  $\tau_l$  é uma escala de tempo relacionada às reações químicas considerando um escoamento laminar. Quando  $Da$  é baixo, os progressos das reações são controladas essencialmente pelas velocidades das reações químicas e, quando ele é muito alto, apenas a mistura turbulenta influencia nas variações das concentrações (POINSOT; VEYNANTE, 2005).

$$Da = \frac{\tau_{turbulência}}{\tau_{química}} \quad (3.54)$$

Figura 18 – Curvas normalizadas das taxas das reações em regimes laminar e turbulento



Fonte: adaptado de Poinso e Veynante (2005).

Uma observação importante para ambientes onde há ignição de combustível é a de que a ignição é controlada predominantemente pelas características laminares, como discutido por Abraham *et al.* (1985). Assim, o efeito da turbulência tende a ser significativo apenas após o atraso de ignição, evitando altos picos de combustão pré-misturada como o apresentado na Figura 9.

### 3.6 Modelos de Combustão Turbulenta

Variados modelos de combustão turbulenta foram propostos e estudados ao longo das últimas décadas, indo de abordagens bem simples para outras bastante complexas que exigem a utilização de ferramentas estatísticas.

Como a combustão turbulenta apresenta diferentes características dependendo das condições do regime turbulento, um modelo pode ser válido apenas para condições específicas (POINSOT; VEYNANTE, 2005). Por isso, para um modelo ser utilizado de forma confiável, é imprescindível que ele seja validado através de dados experimentais com um aparato correspondente ao modelo utilizado na análise com *CFD*.

### 3.6.1 Reator Perfeitamente Agitado

O modelo do Reator Perfeitamente Agitado, ou *Perfectly Stirred Reactor (PSR)*, leva em consideração a mesma hipótese utilizada para regimes laminares de que as características do escoamento não influenciam na cinética química, ou seja, considera que o número de Damköhler é muito pequeno (POINSOT; VEYNANTE, 2005). Assim, o efeito da turbulência na combustão é negligenciado e as taxas de variação de concentração das espécies são calculadas utilizando as concentrações e temperatura média nas equações de Arrhenius, como mostra a Equação 3.55, que seria equivalente a truncar a série de Taylor da Equação 3.51 no primeiro termo.

$$\tilde{\omega}_k(c, T) = \dot{\omega}_k(\tilde{c}, \tilde{T}) = \sum_{i=1}^I (v''_{k,i} - v'_{k,i}) \cdot q_i(\tilde{c}, \tilde{T}) \quad (3.55)$$

O problema desta abordagem está na hipótese do baixo número de Damköhler, o qual não se aplica para a maioria dos casos. Ela é encontrada em problemas bastante simplificados e em casos específicos, como combustão supersônica. No geral, as taxas seguem o comportamento mostrado na Figura 18, que evidencia o erro de considerar a taxa média a partir das médias das concentrações e temperatura. Esta abordagem pode gerar grandes erros, onde as taxas podem ter ordens de grandezas diferentes das do caso real (POINSOT; VEYNANTE, 2005).

### 3.6.2 Eddy Dissipation Combustion Model

Magnussen e Hjertager (1977) propôs um modelo de combustão, chamado *Eddy Dissipation Combustion Model (EDCM)*, que desconsidera completamente o efeito da cinética química e assume que as taxas são controladas exclusivamente pela turbulência, mais especificamente pela dissipação dos vórtices turbulentos. Seu trabalho foi baseado diretamente nos estudos e do modelo estudado por Spalding (1971), o qual sugeriu um modelo chamado *Eddy Break-Up (EBU)*. A proposta de Magnussen foi diminuir a quantidade de entradas difíceis de serem obtidas, como a flutuação da fração de mistura, além de criar um modelo que pudesse ser aplicado tanto para a simulação da combustão pré-misturada quanto para a difusiva, o que era uma limitação do modelo de Spalding (MAGNUSSEN; HJERTAGER, 1977).

Com a hipótese de que as reações químicas, em muitos casos, ocorrem muito rapidamente, o modelo leva em consideração a escala de tempo turbulenta  $\tau_t = k/\varepsilon$  para calcular as taxas de consumo de combustível pela concentração média de combustível, como mostrado na Equação 3.56; de oxigênio, como mostrado na Equação 3.57; e de produtos, como mostrado na Equação 3.58.  $A$  é uma constante calibrável e  $B$  é uma constante com valor 0,5. De acordo com

Magnussen, a taxa com o menor valor entre as três define o progresso da combustão na região, resultando na Equação 3.59.

$$\dot{\omega}_{C,C} = A \cdot \tilde{c}_C / \tau_t \quad (3.56)$$

$$\dot{\omega}_{C,O_2} = A \cdot (\tilde{c}_{O_2} / afs) / \tau_t \quad (3.57)$$

$$\dot{\omega}_{C,prod} = A \cdot B \cdot (\tilde{c}_{prod} / (1 + afs)) / \tau_t \quad (3.58)$$

$$\tilde{\omega}_C = \min(\dot{\omega}_{C,C}; \dot{\omega}_{C,O_2}; \dot{\omega}_{C,prod}) \quad (3.59)$$

Com uma hipótese completamente em desacordo com a utilizada pelo *PSR*, o modelo é adequado para regimes onde o tempo turbulento é muito maior que o químico, ou seja, o número de Damköhler é muito maior que 1. Apesar de tal exigência, o modelo resulta em valores satisfatórios para vários casos (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007), concordando com os comportamentos observados por Spalding (1971). Em regiões próximas a paredes, no entanto, a razão  $\tau_t = k/\varepsilon$  tende a zero, fazendo a Equação 3.59 tender para infinito e resultando em uma queima que acelera de forma não realística ao se aproximar das paredes (POINSOT; VEYNANTE, 2005).

A fim de mitigar esse problema, o modelo de Magnussen foi alterado para considerar também reações químicas, utilizando um mecanismo de poucos passos para calcular a taxa de acordo com o modelo *PSR* e utilizando esse valor como um mecanismo de controle, como mostrado na Equação 3.60. Tal alteração foi estudada e demonstrou resultados satisfatórios (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

$$\tilde{\omega}_C = \min(\dot{\omega}_{C,C}; \dot{\omega}_{C,O_2}; \dot{\omega}_{C,prod}; \dot{\omega}_{C,PSR}) \quad (3.60)$$

### 3.6.3 Modelo de Combustão de Tempos Característicos

Abraham *et al.* (1985) originalmente propôs um modelo de combustão, chamado Modelo de combustão de tempos característicos, ou *Characteristic Time Combustion Model (CTCM)*, o qual usa a Equação 3.61 para encontrar o valor da taxa de variação de concentração

da espécie  $k$ , onde  $c_k^*$  indica a concentração de equilíbrio termodinâmico local da espécie e  $\tau_c$  é o chamado tempo característico, sendo o tempo necessário para tal equilíbrio ser atingido.

$$\tilde{\omega}_k = - \frac{\tilde{c}_k - c_k^*}{\tau_c} \quad (3.61)$$

Nesse estudo, o tempo característico foi considerado igual para todas as espécies e é composto pela soma do tempo de conversão laminar  $\tau_l$  com o tempo de mistura turbulenta  $\tau_t$  multiplicado por um fator de atraso  $f$ , como mostrado na Equação 3.62. Essa abordagem é conceitualmente consistente com o modelo proposto por Magnussen e Hjertager (1977), uma vez que o tempo característico é igual ao tempo de mistura turbulenta caso ele predomine em relação ao tempo de conversão laminar ( $\tau_c = \tau_t$  se  $\tau_t \gg \tau_l$ ), além de evitar o problema da aceleração da queima em regiões próximas às paredes. Como nas alterações do modelo de Magnussen, caso o tempo turbulento tenda à zero, em vez de uma aceleração das taxas, apenas o tempo de conversão laminar é utilizado. O fator de atraso é um número que aumenta ao longo da combustão e multiplica o tempo de mistura turbulenta na Equação 3.61, simulando o aumento da significância da turbulência à medida que a queima avança. Ele foi originalmente modelado para motores de ignição por centelha, limitando o modelo de combustão para apenas esses tipos de motores.

$$\tau_c = \tau_l + f \cdot \tau_t \quad (3.62)$$

Na abordagem original, o tempo de conversão laminar era obtido pela combinação da velocidade laminar de chama com a taxa de variação de concentração utilizando a Equação 3.61 com  $\tau_c = \tau_l$ . Como  $\tau_c$  foi considerado igual para todas as espécies, o modelo original poderia ser acoplado à química complexa sem limitações, o que é uma melhoria quando comparado a outros modelos na época. No entanto,  $\tau_c$  depende de dados experimentais muito específicos que exigem uma configuração experimental de alta precisão e podem ser caros. Patterson *et al.* (1994) modificou o modelo para adquirir o tempo de conversão laminar utilizando a equação de Arrhenius para o taxa de consumo de combustível considerando a concentração de equilíbrio de combustível como sendo zero. O modelo se limita para apenas uma reação, mas o torna facilmente implementável, já que  $\tau_c$  pode ser encontrado usando a Equação 3.63.

$$\tau_l = - \frac{\tilde{c}_C}{\dot{\omega}_C(\tilde{c}, \tilde{T})} \quad (3.63)$$

Uma nova equação para o fator de atraso também foi introduzida por Patterson, permitindo sua utilização para motores sem ignição por centelha. A Equação 3.64 é usada para

calcular  $f$ , onde  $Y$  é a fração mássica e  $r$  é calculado pela Equação 3.65 e indica a completude local da combustão, variando de 0 a 1. Assim, no início da combustão, a turbulência não desempenha nenhum papel, e ao longo da queima sua significância aumenta gradativamente, como observado por Spalding (1971).

$$f = \frac{1 - e^{-r}}{0.632} \quad (3.64)$$

$$r = \frac{\tilde{Y}_{CO_2} + \tilde{Y}_{H_2O} + \tilde{Y}_{CO} + \tilde{Y}_{H_2}}{1 - \tilde{Y}_{N_2}} \quad (3.65)$$

Xin *et al.* (1997) estudou a influência da consideração de diferentes tempos característicos para  $CO$  e  $H_2$  e concluiu que, uma vez que essas espécies atingem a concentração de equilíbrio mais rapidamente que o combustível, seus  $\tau_c$  deveriam ser uma fração de  $\tau_{c,C}$ . Resultados experimentais mostraram que o valor apresentado na Equação 3.66 leva a uma melhor previsão do progresso da combustão. O fato de que diferentes tempos característicos devam ser usados para espécies específicas é mais um fator que limita a utilização do modelo com um mecanismo complexo de reação.

$$\tau_{c,CO} = \tau_{c,H_2} = 0.2 \cdot \tau_{c,C} \quad (3.66)$$

Este estudo também levou em consideração o fato de que é possível ter gases de exaustão na câmara de combustão antes do início da combustão, especialmente quando a Recirculação dos Gases de Exaustão (*EGR*) é utilizada. Este gás residual gera um erro no cálculo da completude da combustão pela Equação 3.65 proposta por Patterson, o qual se torna mais evidente à medida que a fração inicial dos gases de escape aumenta. Assim, Xin *et al.* utilizaram a Equação 3.67 para a completude, onde o índice  $r$  indica a fração mássica residual.

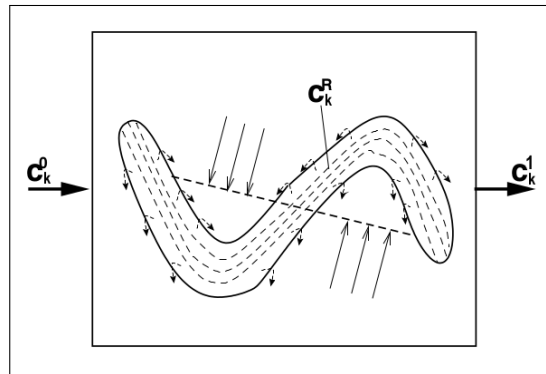
$$r = \frac{\tilde{Y}_{CO_2} + \tilde{Y}_{H_2O} + \tilde{Y}_{CO} + \tilde{Y}_{H_2}}{1 - \tilde{Y}_{CO_2,r} - \tilde{Y}_{H_2O,r} - \tilde{Y}_{N_2}} \quad (3.67)$$

### 3.6.4 Reator Parcialmente Agitado

O modelo do Reator Parcialmente Agitado, ou *Partially Stirred Reactor (PaSR)*, proposto por Golovitchev *et al.* (2000), se baseia no fato de que as chamas são muito mais finas que qualquer célula computacional. Dessa forma, assumir que toda a célula é um reator perfeitamente misturado é uma hipótese que superestima o progresso da combustão.

A Figura 19 apresenta um esquema de como o modelo aborda a célula computacional. Ela é dividida em duas zonas: a zona reativa, a qual reage como um reator perfeitamente misturado, e a zona não reativa. Da esquerda para a direita,  $\tilde{c}_k^0$  é a concentração da espécie  $k$  na entrada do reator,  $\tilde{c}_k^R$  é a concentração na zona reativa e  $\tilde{c}_k^1$  é a concentração da saída do reator. Portanto, o progresso do tempo é análogo ao comprimento percorrido pelo escoamento no reator, onde  $\tilde{c}_k^0$  é a concentração no início do passo de tempo e  $\tilde{c}_k^1$  a concentração no fim do passo.

Figura 19 – Conceito de um reator parcialmente misturado



Fonte: adaptado de Tao *et al.* (2000).

A combustão é considerada um processo sequencial, onde, após as reações químicas ocorrerem na zona reativa, os produtos se misturam com a zona não reativa, resultando na concentração  $\tilde{c}_k^1$ . Por conservação de massa, a concentração no fim no passo de tempo pode ser relacionada com as outras concentrações pela Equação 3.68. Assim, plotando a concentração em função do tempo, a Figura 20 é obtida. Como  $\tilde{c}_k^1$  é a concentração no fim do passo de tempo,  $\tau$  é o tamanho do passo de tempo. O tempo  $\tau_{mix}$  é o tempo de mistura turbulenta (NORDIN, 2001).

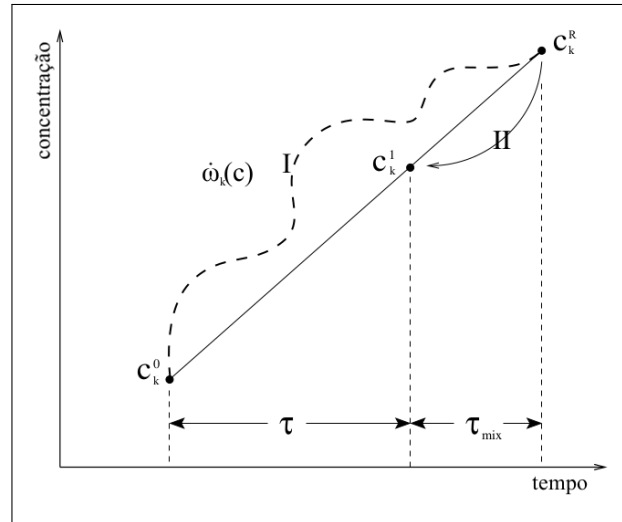
$$\tilde{c}_k^1 = \kappa^* \cdot \tilde{c} + (1 - \kappa^*) \cdot \tilde{c}_k^0 \quad (3.68)$$

Sendo uma função linear, a inclinação da reta entre  $\tilde{c}_k^0$  e  $\tilde{c}_k^1$  é a mesma que  $\tilde{c}_k^1 - \tilde{c}_k^R$ . Considerando que a inclinação da reta é igual à taxa de variação da concentração na zona reativa, a relação mostrada na Equação 3.69 também relaciona as concentrações. Rearranjando a Equação 3.69 para o formato da Equação 3.68, é possível encontrar a Equação 3.70 para a constante  $\kappa^*$ .

$$\frac{\tilde{c}_k^1 - \tilde{c}_k^0}{\tau} = \frac{\tilde{c}_k^R - \tilde{c}_k^1}{\tau_{mix}} = \dot{\omega}_k(\tilde{c}_k^R) \quad (3.69)$$

$$\kappa^* = \frac{\tau}{\tau + \tau_{mix}} \quad (3.70)$$

Figura 20 – O procedimento de reação seguido de mistura



Fonte: adaptado de Nordin (2001).

No entanto, a taxa é calculada utilizando as concentrações da zona reativa  $\tilde{c}_k^R$ , as quais não são calculadas. Utilizando série de Taylor truncada na primeira derivada para calcular  $\dot{\omega}_k(\tilde{c}_k^R)$  a Equação 3.71 é obtida. O termo  $\partial\dot{\omega}_k/\partial c_k$  é considerado o inverso de um tempo químico  $\tau_{chem}$ . Combinando e rearranjando as Equações 3.68 e 3.71, a Equação 3.72 é encontrada, sendo considerada a equação do *PaSR*, onde  $\kappa$  é calculado pela Equação 3.73. O tempo de mistura turbulenta pode ser calculado pela Equação 3.74, onde  $A$  é uma constante (GOLOVITCHEV *et al.*, 2000). De acordo com Nordin (2001),  $A$  deve assumir valores entre 0,001 e 0,3. O termo  $\partial\dot{\omega}_k/\partial c_k$  é calculado utilizando as equações no fim do passo de tempo. Por isso, a implementação do modelo exige um método de obter o valor desse termo, além de uma forma de encontrar o valor do tempo químico  $\tau_{chem}$ .

$$\dot{\omega}_k(\tilde{c}_k^R) = \dot{\omega}_k(\tilde{c}_k^1) + \frac{\partial\dot{\omega}_k}{\partial c_k} \cdot (\tilde{c}_k^R - \tilde{c}_k^1) \quad (3.71)$$

$$\tilde{\omega}_k(c_k^0) = \kappa \cdot \dot{\omega}_k(\tilde{c}_k^0) \quad (3.72)$$

$$\kappa = \frac{\tau_{chem}}{\tau_{chem} + \tau_{mix}} \quad (3.73)$$

$$\tau_{mix} = A \cdot \frac{k}{\varepsilon} \quad (3.74)$$



## 4 METODOLOGIA

### 4.1 Motor em estudo

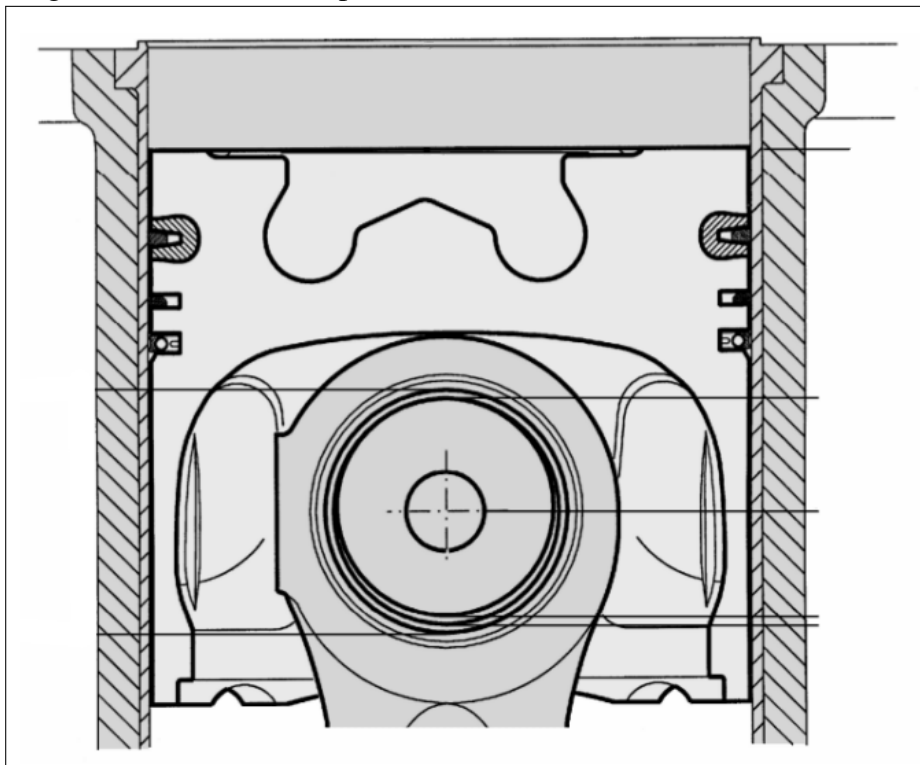
O motor utilizado como referência para as simulações foi o MWM Sprint 6.07T, um motor de ciclo diesel turbo-aspirado, com dados técnicos mostrados na Tabela 4 e a geometria do copo do pistão mostrada na Figura 21. Os dados do motor foram todos fornecidos pelo Laboratório de Motores de Combustão Interna da Universidade Federal do Ceará (LMCI).

Tabela 4 – Especificações técnicas do motor de referência

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

Fonte: material do LMCI.

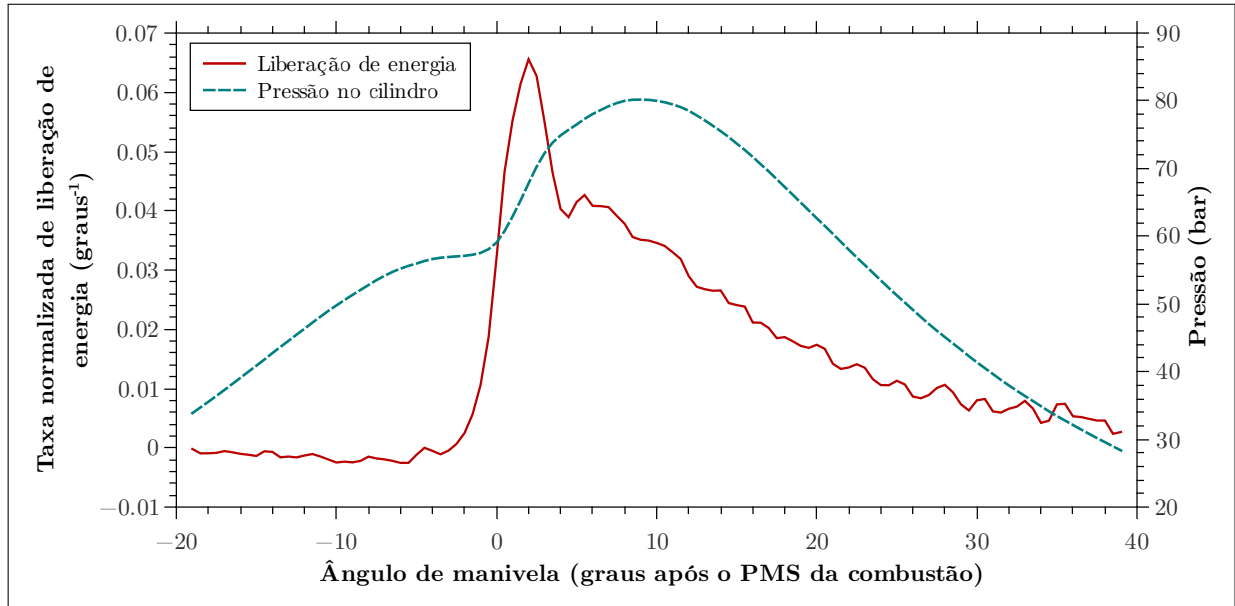
Figura 21 – Formato do pistão do motor de referência



Fonte: adaptado de MWM (2001).

O LMCI forneceu dados de funcionamento do motor com diesel puro em regime de alta carga, operando a 2100 rpm. Foram fornecidos dados de pressão e de taxa de liberação de energia química devido à queima de combustível, mostrados na Figura 22. Os valores de taxa de liberação de energia foram normalizados pela quantidade de energia disponível pela massa de combustível injetada (poder calorífico inferior do diesel vezes a massa injetada).

Figura 22 – Dados de pressão e liberação de energia do motor de referência a 2100 rpm



Fonte: material do LMCI.

## 4.2 Abordagem numérica

As simulações foram realizadas utilizando o software Kiva-3V, desenvolvido em FORTRAN para simulações de escoamentos multifásicos, turbulentos e reativos através de *CFD*. Esse software é bastante utilizado para pesquisas em motores de combustão interna devido à acessibilidade ao seu código fonte. Assim, pesquisadores têm a liberdade de desenvolver modelos próprios e implementar em um *software* de *CFD* ou validar modelos propostos recentemente. A licença foi concedida pelo LMCI.

O Kiva-3V utiliza diferenças finitas para discretizar as equações de transporte da conservação de massa, momento e energia; e o método *RANS* para levar em consideração a turbulência. O modelo de turbulência utilizado foi o  $k - \epsilon$  padrão.

Para o combustível líquido, foram considerados modelos de *breakup*, evaporação, arrasto, choque contra a parede e a formação de filmes líquidos. O modelo de quebra do código fonte original do Kiva-3V é o *TAB*. O modelo de evaporação de líquido monocomponente e o de

arrasto de uma gota esférica foram utilizados. Os modelos de choque na parede e formação de filmes líquidos são discutidos por Amsden (1997). Não foi utilizado modelo de colisão entre gotas. Um fluxograma do funcionamento do software é apresentado no Anexo A.

#### 4.2.1 Alterações no Kiva-3V

A única modificação no código fonte realizada para este trabalho foi a implementação de cinética química complexa, uma vez que o LMCI disponibilizou uma versão do Kiva-3V com a implementação do modelo *Blob-KH-RT*. Assim, como posto nos objetivos, apenas a complexidade da cinética química e do modelo de quebra de gotas foi analisado. As taxas de progresso das reações químicas foram calculadas utilizando a biblioteca de cinética química CHEMKIN-II, produzida pela Sandia National Laboratories (KEE *et al.*, 1989). A implementação do CHEMKIN-II no Kiva-3V permite que todas as propriedades da fase gasosa das espécies, assim como as reações do mecanismo, sejam fornecidas no formato lido pelo CHEMKIN-II.

Devido à natureza da cinética química, as taxas de variação das concentrações de todas as espécies são dependentes entre si, além de dependerem também da variação da temperatura ao longo do tempo, compondo assim um sistema de EDO com  $n_{sp} + 1$  equações, como mostrado na Equação 4.1. O lado direito das equações depende do modelo utilizado.

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\omega}_1 = \dots \\ \vdots \\ \tilde{\omega}_{n_{sp}} = \dots \\ \frac{dT}{dt} = \dots \end{array} \right. \quad (4.1)$$

A taxa de variação das concentrações das espécies têm valores de diferentes ordens de grandeza, onde algumas espécies exigem um passo de integração que em sua maioria são menores que a resolução dos computadores atuais. Isso caracteriza a Equação 4.1 como um sistema de EDO rígido. Existem diferentes estratégias para a integração de sistemas de EDO rígidos. A abordagem original do Kiva-3V utiliza um método semi-implícito bastante robusto, o qual garante convergência e tem alta eficiência computacional, porém recomendado para pequenos sistemas de EDO (PRESS *et al.*, 2007). A abordagem da versão modificada do Kiva-3V utiliza o pacote VODE de integração de EDO, o qual realiza a integração também de sistemas rígidos (BROWN *et al.*, 1989). O pacote VODE integra sistemas de EDOs com alta precisão. Ele leva em consideração as variações de concentração e temperatura que podem ocorrer ao longo

do passo de tempo do Kiva-3V pela divisão do passo de tempo em passos menores. Um lado negativo do VODE é o maior tempo de processamento quando comparado ao semi-implícito.

Como apresentado no Anexo A, a cinética química é considerada na subrotina *chem*, atualizando os valores de concentrações e de energia interna da mistura devido à liberação de energia de cada célula separadamente. Assim, apesar da temperatura ser um parâmetro integrado juntamente com as concentrações, seu valor nas células é alterado apenas na subrotina *state*.

### 4.3 Implementação do Reator Perfeitamente Agitado

Os dois casos estudados neste trabalho utilizaram o modelo do *PSR* para interação da turbulência com a química, desconsiderando a influência da turbulência. A implementação do *PSR*, no entanto, teve uma abordagem diferente no que diz respeito à integração das EDOs. A formulação do método semi-implícito utilizado originalmente pelo Kiva-3V, não é explicado no seu manual. Assim, as subseções seguintes se propõem a explicar tanto o equacionamento do método semi-implícito quanto as hipóteses consideradas na implementação do pacote VODE.

#### 4.3.1 Integração pelo método semi-implícito

A abordagem original do Kiva-3V considera a influência de cada reação nas concentrações de forma sequencial, onde o progresso da reação *i* é calculada utilizando as concentrações atualizadas pelas reações antes de *i*, mas não depois de *i*. O esquema de Euler implícito é aplicado a cada taxa de progresso das reações. De forma geral, o esquema de Euler utiliza a expressão

$$y^1 = y^0 + h \cdot y', \quad (4.2)$$

onde o sobrescrito 0 indica o valor no início do passo de integração, o 1 indica o valor no final e o *h* é o tamanho do passo de integração. Utilizando o valor de *y'* do fim do passo de integração para tornar o esquema implícito, surge a expressão

$$y^1 = y^0 + h \cdot y^1. \quad (4.3)$$

Se *y'* for uma função linear em relação a *y*, da forma

$$y' = K \cdot y, \quad (4.4)$$

é possível encontrar o valor de *y*<sup>1</sup> através da junção da Equação 4.3 com a Equação 4.4

$$y^1 = \frac{y^0}{1 - h \cdot K}. \quad (4.5)$$

A aplicação desse método na cinética química parte da utilização da Equação 4.3 para a atualização dos valores das concentrações devido à reação  $i$ ,

$$\tilde{c}_{k,i}^1 = \tilde{c}_{k,i}^0 + \tau \cdot \dot{\omega}_{k,i}(\tilde{c}^1, T), \quad (4.6)$$

onde  $\tau$  é o passo de tempo do Kiva-3V.

Para a obtenção do valor de  $\dot{\omega}_{k,i}(\tilde{c}^1, T)$  o método de Euler também é aplicado, porém considerando o efeito da reação apenas na espécie arbitrária  $s$ , a qual deve estar nos reagentes ou nos produtos da reação  $i$ . A taxa de variação da concentração  $s$  é aproximada para uma função linear em relação à própria concentração de  $s$ , de acordo com a Equação 4.7, que segue a mesma estrutura da Equação 4.4, porém sem a função ser realmente linear, o que caracteriza um esquema semi-implícito.

$$\dot{\omega}'_{s,i} = K \cdot \dot{\omega}_{s,i}, \quad (4.7)$$

A Equação 4.7 resulta na Equação 4.8.  $K$ , no entanto, ainda precisa ser encontrado.

$$\dot{\omega}_{s,i}(\tilde{c}^1, T) = \frac{\dot{\omega}_{s,i}(\tilde{c}^0, T)}{1 - \tau \cdot K}. \quad (4.8)$$

Como apenas a reação  $i$  está sendo considerada na variação de  $c_s$ , é possível reduzir a Equação 3.41 para

$$\dot{\omega}_{s,i} = g\dot{e}r_{s,i} - d\dot{e}s_{s,i} \quad (4.9)$$

e, linearizando a partir dos valores no início do passo de tempo ao redor de  $c_s$ ,

$$\dot{\omega}_{s,i} = g\dot{e}r_{s,i}^0 - d\dot{e}s_{s,i}^0 \cdot \frac{c_s}{\tilde{c}_{s,i}^0}, \quad (4.10)$$

a qual garante que, se ela for utilizada no início do passo de tempo,  $\dot{\omega}_{s,i} = \dot{\omega}_{s,i}(\tilde{c}^0, T)$ , uma vez que  $c_{s,i} = c_{s,i}^0$ . Derivando a Equação 4.10 em relação ao tempo, a expressão

$$\dot{\omega}'_{s,i} = K \cdot \dot{\omega}_s^n = - \frac{d\dot{e}s_{s,i}^0}{c_{s,i}^0} \cdot \dot{\omega}_s^n \quad (4.11)$$

é obtida, uma vez que as concentrações no início do passo de tempo são constantes. A Equação 4.8 então se torna

$$\dot{\omega}_{s,i}(\tilde{c}^1, T) = \frac{\dot{\omega}_{s,i}(\tilde{c}^0, T)}{1 + \tau \cdot \frac{d\dot{e}s_{s,i}^0}{c_{s,i}^0}}. \quad (4.12)$$

A Equação 4.12, no entanto, prevê a variação apenas da concentração de  $s$ . Utilizando a Equação 3.39, é possível encontrar a taxa de progresso da reação  $i$ .

$$q_i^1 = \frac{\dot{\omega}_{s,i}(\tilde{c}^1, T)}{\left(v''_{s,i} - v'_{s,i}\right)} = \frac{1}{\left(v''_{s,i} - v'_{s,i}\right)} \cdot \frac{\dot{\omega}_{s,i}(\tilde{c}^0, T)}{1 + \tau \cdot \frac{d\dot{s}_{s,i}^0}{c_{s,i}^0}}. \quad (4.13)$$

Dessa forma, a espécie  $s$  age como uma espécie de referência para o cálculo do valor da taxa de progresso da reação  $n$  no fim do passo de tempo,  $q_i^1$ . Utilizando novamente a Equação 3.39, a taxa de variação de uma espécie qualquer, indicada por  $k$ , é encontrada por

$$\dot{\omega}_{k,i}(\tilde{c}^1, T) = \frac{\left(v''_{k,i} - v'_{k,i}\right)}{\left(v''_{s,i} - v'_{s,i}\right)} \cdot \frac{\dot{\omega}_{s,i}(\tilde{c}^0, T)}{1 + \tau \cdot \frac{d\dot{s}_{s,i}^0}{c_{s,i}^0}}. \quad (4.14)$$

Finalmente, a Equação 4.6 é utilizada para o desenvolvimento da Equação 4.15.

$$\tilde{c}_{k,i}^1 = \tilde{c}_{k,i}^0 + \tau \cdot \frac{\left(v''_{k,i} - v'_{k,i}\right)}{\left(v''_{s,i} - v'_{s,i}\right)} \cdot \frac{\dot{\omega}_{s,i}(\tilde{c}^0, T)}{1 + \tau \cdot \frac{d\dot{s}_{s,i}^0}{c_{s,i}^0}} \quad (4.15)$$

A estabilidade do método explicado acima é garantida quando a espécie de referência  $s$  é a espécie mais provável de ter sua concentração negativa (NORDIN, 2001).

Quando esse método é implementado, o cálculo da variação da energia interna específica do gás na célula devido à reação  $i$  é resolvido de acordo com a Equação 4.16, onde  $h_{f,k}^\circ$  é a entalpia padrão de formação da espécie  $k$  em base molar. É importante notar que, dessa forma, o efeito da variação da temperatura ao longo do passo de tempo no cálculo das taxas de variação de concentrações não é considerado.

$$\bar{e}^1 = \bar{e}^0 - \frac{1}{\bar{\rho}_{\text{célula}}} \cdot \sum_{k=1}^{nsp} (\tilde{c}_k^1 - \tilde{c}_k^0) \cdot h_{f,k}^\circ \quad (4.16)$$

### 4.3.2 Integração pelo VODE

A utilização do pacote VODE exige apenas que o usuário especifique o lado direito das EDOs apresentadas na Equação 4.1. Como o modelo *PSR* desconsidera o efeito da turbulência, o lado direito das primeiras  $nsp$  EDO é calculado diretamente pelo CHEMKIN-II. A EDO da variação da temperatura foi desenvolvida considerando que cada célula é um reator adiabático de volume constante. Nessas condições, a primeira lei da termodinâmica é reduzida para

$$de = 0, \quad (4.17)$$

uma vez que  $P \cdot dv = 0$ . A energia interna específica do sistema pode ser obtida pela média ponderada das energias internas totais da espécies.

$$e = \bar{e} = \sum_{k=1}^{nsp} \tilde{Y}_k \cdot e_k, \quad (4.18)$$

onde  $e_k$  é a energia interna específica total da espécie  $k$ . Derivando a Equação 4.18 em relação ao tempo e utilizando a Equação 4.17,

$$\begin{aligned} \frac{de}{dt} &= \sum_{k=1}^{nsp} \left( \tilde{Y}_k \cdot \frac{de_k}{dt} + e_k \cdot \frac{d\tilde{Y}_k}{dt} \right) = 0 \\ \sum_{k=1}^{nsp} \left( \tilde{Y}_k \cdot \frac{de_k}{dt} \right) &= \sum_{k=1}^{nsp} \left( \tilde{Y}_k \cdot c_{v,k} \cdot \frac{d\tilde{T}}{dt} \right) = \bar{c}_v \cdot \frac{d\tilde{T}}{dt} = - \sum_{k=1}^{nsp} \left( e_k \cdot \frac{d\tilde{Y}_k}{dt} \right). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Finalmente,

$$\frac{d\tilde{T}}{dt} = \frac{1}{\bar{c}_v \cdot \bar{\rho}_{\text{célula}}} \cdot \sum_{k=1}^{nsp} (e_{\text{mol},k} \cdot \tilde{\omega}_k), \quad (4.20)$$

onde  $e_{\text{mol},k}$  é a energia interna específica em base molar da mistura de gases na célula e  $\bar{c}_v$  é o calor específico à volume constante médio da mistura.

Assim, o sistema de EDOs integrado pelo VODE é mostrado na Equação 4.21.

$$\begin{cases} \tilde{\omega}_1 = \omega_1(\tilde{c}, \tilde{T}) \\ \vdots \\ \tilde{\omega}_{nsp} = \omega_{nsp}(\tilde{c}, \tilde{T}) \\ \frac{d\tilde{T}}{dt} = \frac{1}{\bar{c}_v \cdot \bar{\rho}_{\text{célula}}} \cdot \sum_{k=1}^{nsp} (e_{\text{mol},k} \cdot \tilde{\omega}_k) \end{cases} \quad (4.21)$$

Após a integração do sistema, a equação utilizada para encontrar a mudança da energia interna específica da célula a partir da variação da temperatura é a Equação 4.22. Considerando que a variação da temperatura ao longo do passo de tempo não é suficiente para alterar o valor de  $\bar{c}_v$ , ele se torna constante e pode sair da integral. Assim, a atualização da energia interna foi calculada pela Equação 4.23.

$$\bar{e}^1 = \bar{e}^0 + \int_{\tilde{T}^0}^{\tilde{T}^1} \bar{c}_v \cdot dT \quad (4.22)$$

$$\bar{e}^1 = \bar{e}^0 + \bar{c}_v \cdot (\tilde{T}^1 - \tilde{T}^0) \quad (4.23)$$

O código fonte em FORTRAN da implementação deste modelo é apresentado no Apêndice A.

#### 4.4 Resumo dos casos estudados

A Tabela 6 apresenta um resumo dos dois casos. O caso rodando com o *software* original funcionou com o combustível diesel disponível inicialmente pela biblioteca de combustíveis do Kiva-3V.

O n-dodecano ( $n\text{-C}_{12}\text{H}_{26}$ ) foi utilizado como substituto do diesel no caso com cinética química complexa, devido ao seu alto número de cetano. Para isso, um mecanismo de reações com 54 espécies químicas e 269 reações foi utilizado, desenvolvido por Yao *et al.* (2017). O mecanismo é resultado de uma redução a partir de um mecanismo de n-dodecano detalhado. Sua proposta é prever o comportamento da cinética química do n-dodecano em baixas e altas temperaturas com um número reduzido de espécies e reações, porém mantendo as características principais do n-dodecano. Ele foi validado com dados experimentais de auto-ignição e em casos de *PSR*.

Tabela 5 – Resumo dos dois casos estudados

	Kiva-3V Original	Kiva-3V Modificado
Combustível	Diesel	n-Dodecano
Número de espécies	12	54
Número de reações	4	269
Método de integração	Semi-implícito	VODE
Modelo de <i>breakup</i>	TAB	Blob-KH-RT

Fonte: o autor.

#### 4.5 Geração da malha

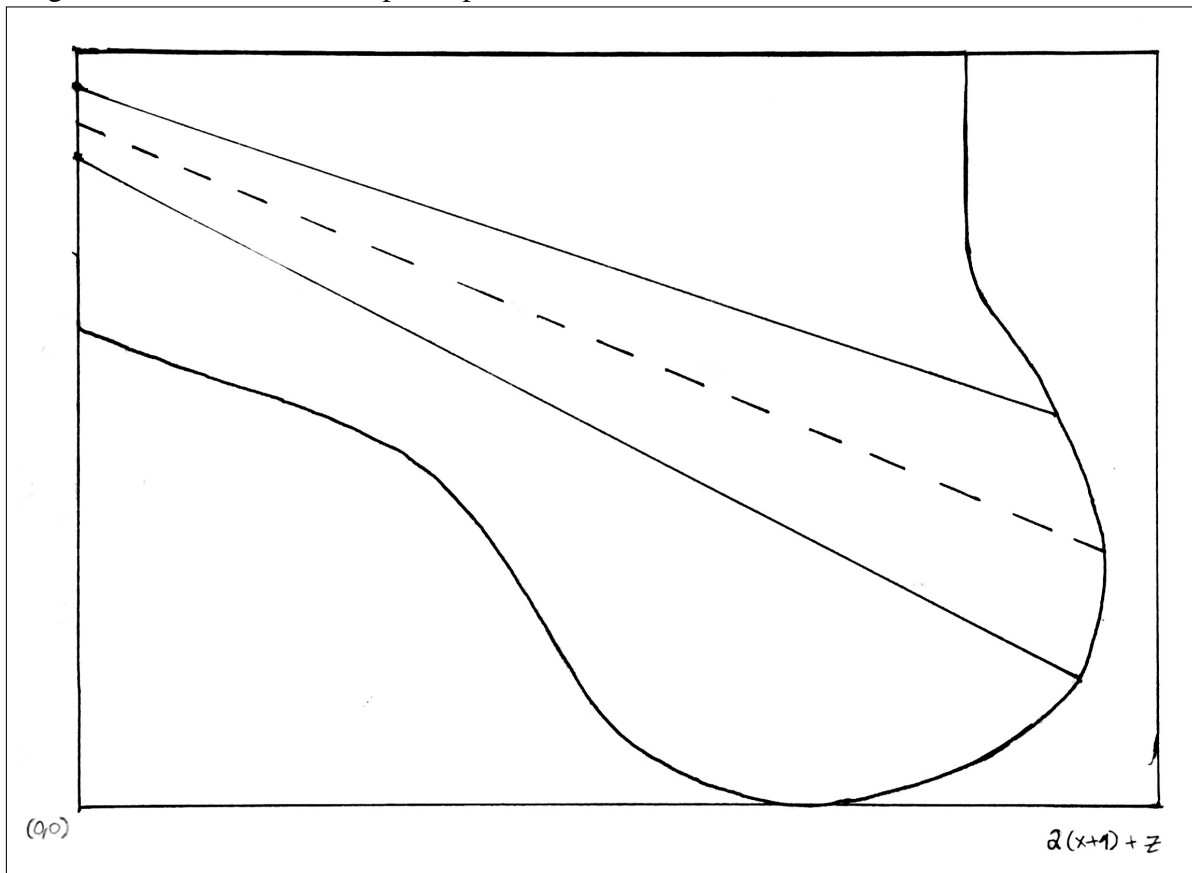
A malha utilizada representa apenas um quinto do domínio da câmara de combustão, um para cada orifício do bico injetor, com a aplicação de simetria cíclica para economia de processamento computacional. A quantidade e o tamanho das células entre o topo do pistão e o cabeçote variam ao longo da simulação devido ao movimento do pistão.

A geração de malha do copo do pistão leva em consideração sua geometria. O contorno do copo do pistão foi desenhado à mão para a obtenção das coordenadas de pontos no perfil e as coordenadas foram utilizadas para a geração no *software* K3PREP. O refinamento da malha é definido pela distância entre os pontos. O copo foi dividido em três regiões, mostrados na Figura 23, para a utilização de graus de refinamento diferentes ao redor do *spray*.

O estudo de convergência de malha da região do *spray* e do resto do domínio foram



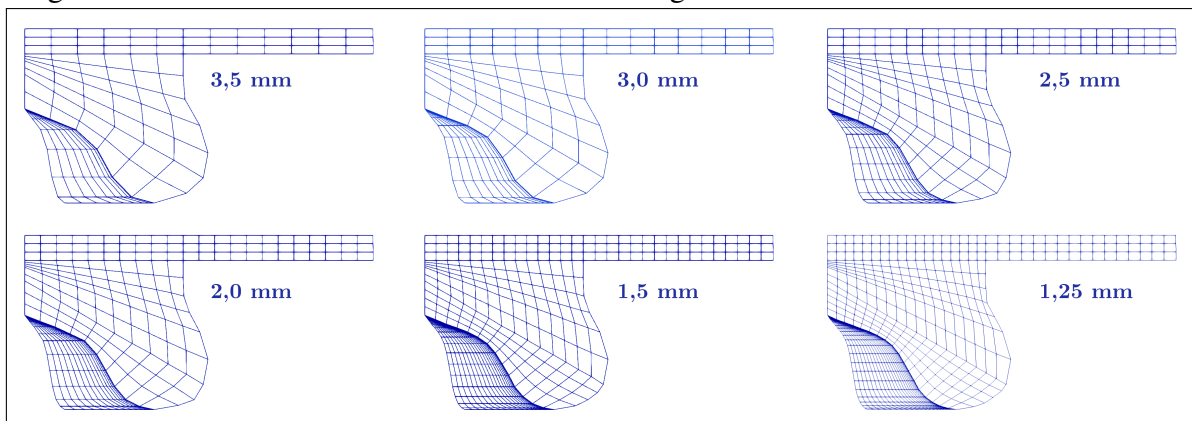
Figura 23 – Contorno do copo do pistão



Fonte: o autor.

realizados separadamente. Ao todo, 6 malhas foram utilizadas, com a referência do refinamento sendo o tamanho aproximado das arestas das células superiores do copo. Os tamanhos utilizados foram 3,5 mm, 3,0 mm, 2,5 mm, 2,0 mm, 1,5 mm e 1,25 mm, mostradas na Figura 24. O refinamento da região do *spray* foi realizado aumentando o número de camadas na vertical. Durante o estudo de convergência do resto do domínio, a região do *spray* foi mantida com apenas duas camadas.

Figura 24 – Malhas utilizadas no estudo de convergência



Fonte: o autor.

#### 4.6 Condições iniciais e de contorno

A Tabela 6 mostra os valores das condições iniciais e de contorno, os quais foram escolhidos baseando-se nos dados experimentais. Vale ressaltar que o valor do ângulo de injeção foi escolhido de acordo com uma faixa de possíveis valores. Durante o funcionamento do motor, o ângulo de injeção era 7,5 graus antes do PMS, com uma variação de  $\pm 3$  graus. Assim, foi escolhido o valor com a injeção mais tardia, 4,5 graus antes do PMS. Dessa forma, caso a simulação resulte em uma ignição tardia, é possível adiantar a injeção de forma a coincidir com o experimental sem fugir dos parâmetros de funcionamento. Porém, se a combustão simulada for adiantada em relação ao experimental, a alteração do ângulo de injeção para o ajuste da validação resultaria em uma divergência em relação aos parâmetros de funcionamento.

Tabela 6 – Condições iniciais e de contorno

Temperatura das paredes	598 K
Temperatura do pistão	637 K
Temperatura do cabeçote	602,2 K
Temperatura inicial do gás	404,8 K
Pressão inicial da câmara	1,381 bar
Massa injetada	33 mg
Temperatura do combustível	313,15 K
Ângulo de injeção	4,5 graus antes do PMS

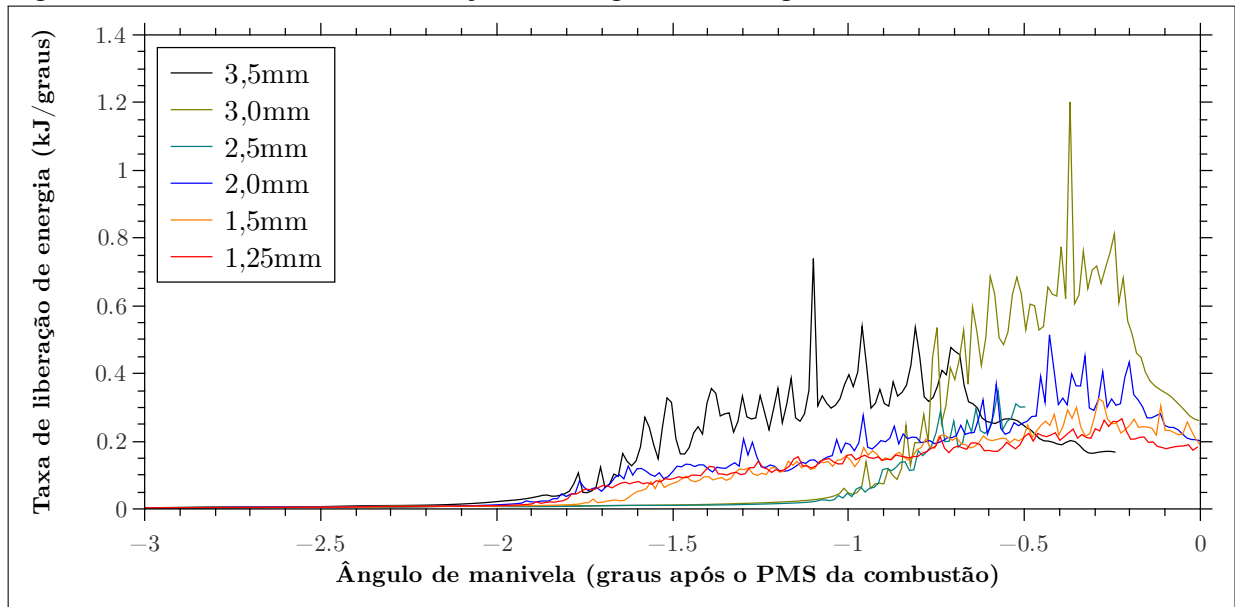
Fonte: dados fornecidos pelo LMCI.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 5.1 Convergência de malha

A Figura 25 mostra a variação da curva de taxa de liberação de energia durante o estudo de convergência da malha do domínio sem o refino da região do *spray*, onde o atraso de ignição foi avaliado. Com a hipótese de que a cinética química detalhada exige maior refinamento, o estudo foi realizado com a versão alterada do Kiva-3V. As curvas da malha de 2,0 mm, 1,5 mm e 1,25 mm apresentaram comportamentos similares, com diferenças no atraso de ignição de aproximadamente um grau e meio. Portanto, a malha com células de aproximadamente 2,0 mm de aresta foi a escolhida, a fim de reduzir o custo computacional sem perda de exatidão.

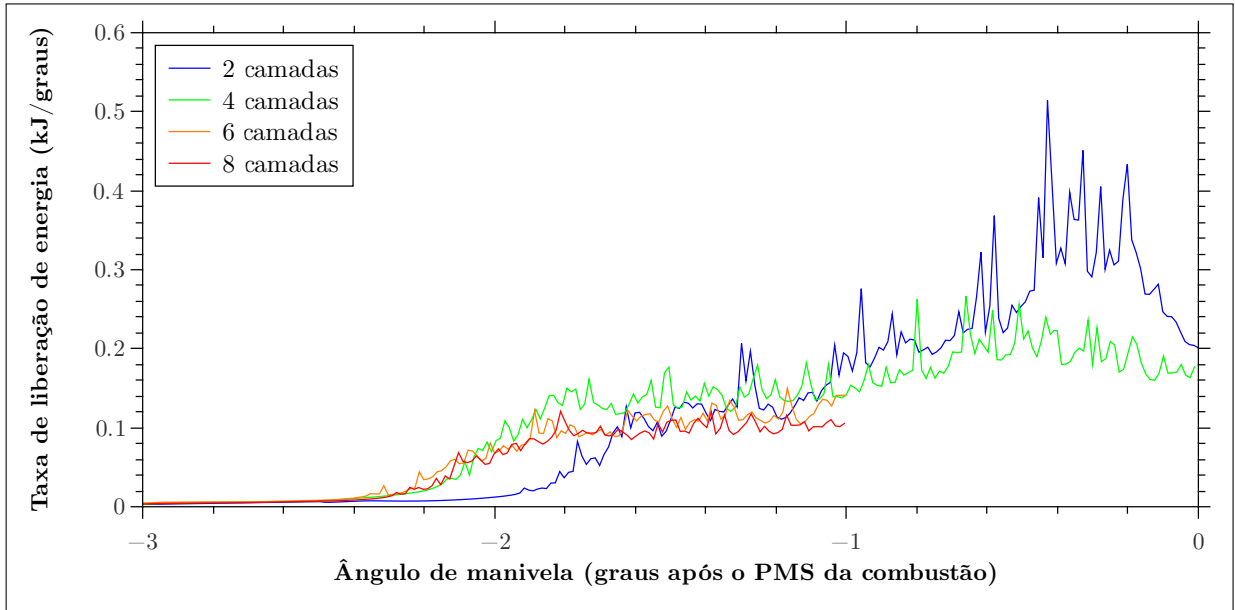
Figura 25 – Curva de taxa de liberação de energia na convergência do domínio



Fonte: o autor.

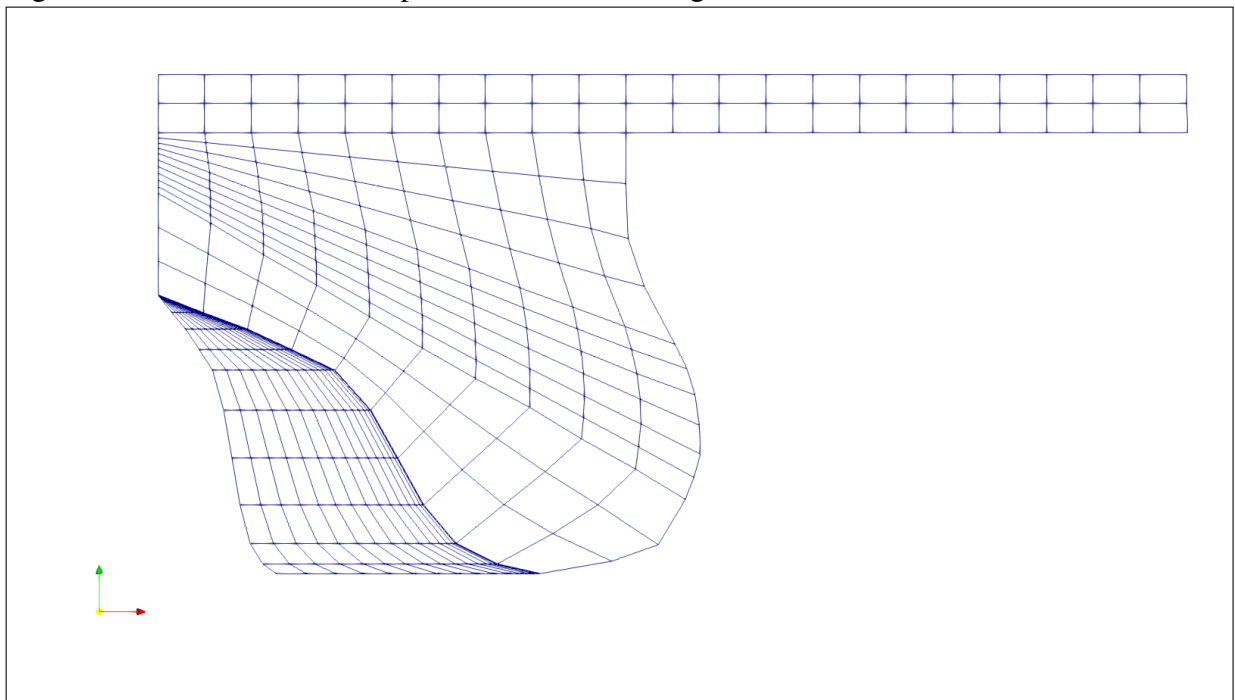
O refinamento da região do *spray* foi realizado a partir da malha escolhida. A Figura 26 mostra o desenvolvimento da curva de taxa de liberação de energia com o aumento do número de camadas verticais. As curvas das malhas com 4, 6 e 8 camadas apresentaram o mesmo atraso de ignição. No entanto, a parcela pré-misturada da malha de 4 camadas demonstra um maior pico. Por inspeção, as curvas de 6 e oito camadas se comportaram de forma mais similar. Por isso, 6 camadas foram utilizadas para as simulações. A malha é mostrada na Figura 27.

Figura 26 – Curva de taxa de liberação de energia na convergência da região do *spray*



Fonte: o autor.

Figura 27 – Malha escolhida após o estudo de convergência



Fonte: o autor.

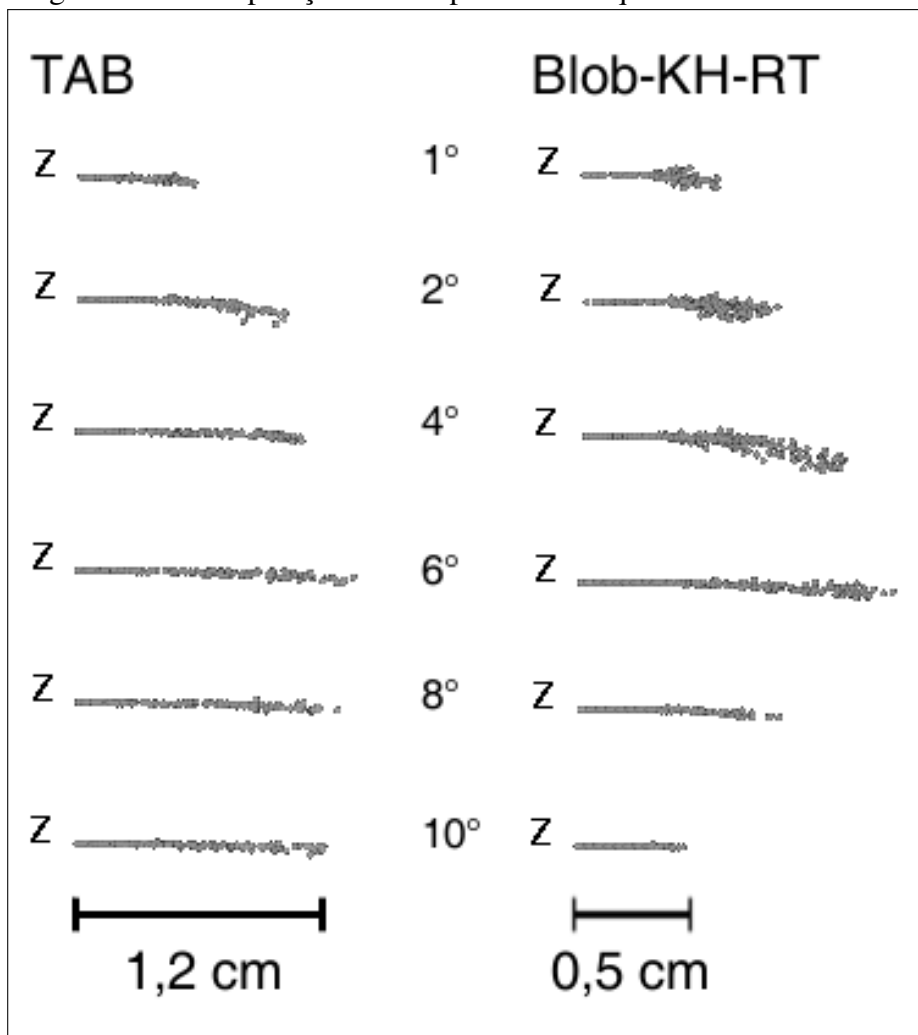
## 5.2 Análise qualitativa

### 5.2.1 Comprimento de quebra

A Figura 28 apresenta uma comparação entre o comprimento de quebra utilizando o *TAB*, do código original do Kiva-3V, e o comprimento utilizando o *Blob-KH-RT*. Os ângulos apresentados são do eixo de manivela em graus após o início da injeção de combustível. A

modificação do modelo de *breakup* resultou em um comprimento de quebra, após 10 graus, que equivale a menos da metade do comprimento com o *TAB*. Pode-se afirmar também que a quebra resultou em gotas menores na ponta final do *spray* pela curvatura do jato aos 4 graus, uma vez que as gotas sofreram maior efeito do arrasto, o qual não teve seu modelo alterado. O efeito do comportamento de quebra diferenciado deve influenciar também na formação da mistura ar-combustível, devido à mudança na taxa de evaporação.

Figura 28 – Comparação do comprimento de quebra



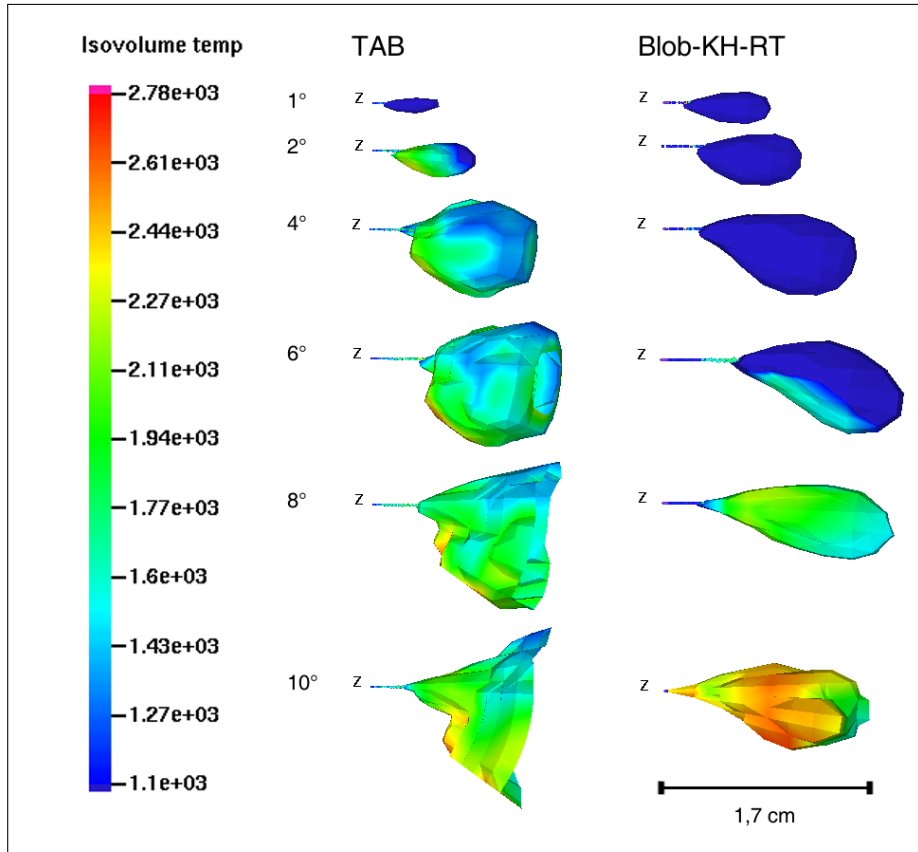
Fonte: o autor.

### 5.2.2 Formação da mistura ar-combustível

A região preenchida apresentada na Figura 29 representa o volume o qual os valores de razão de equivalência se encontram entre 1 e 1,5, valores que Heywood (1988) indica como sendo uma região propensa à auto-ignição. A formação de vapor após a modificação do modelo

de quebra se assemelha ao comportamento esquematizado na Figura 8, assim como vai de acordo com a Figura 4, com o vapor de combustível envolvendo o núcleo líquido.

Figura 29 – Comparação da formação da mistura ar-combustível



Fonte: o autor.

O modelo original, no entanto, apresentou formação de mistura que se concentra excessivamente na ponta do *spray*, o que pode estar relacionado à falta de gotas menores o suficiente no restante do jato para uma adequada taxa de evaporação.

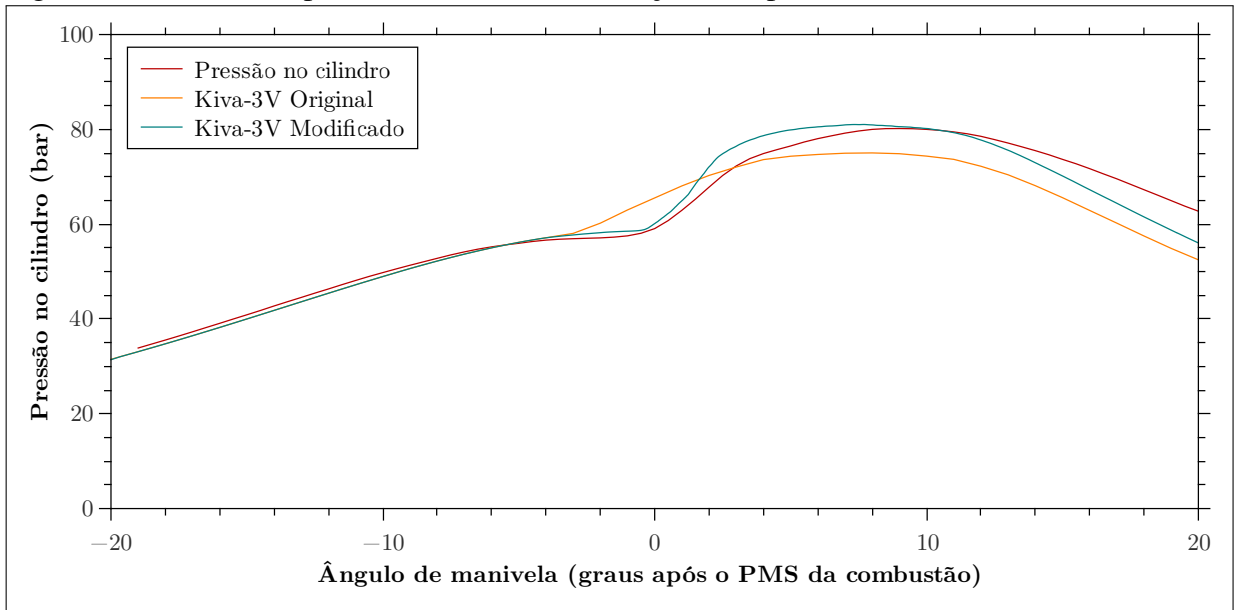
Além das diferenças na formação da mistura, o aumento da temperatura ao longo da injeção ocorreu de forma mais abrupta no *software* original, onde a mistura ar-combustível já apresentava temperaturas acima de 2000 K já dois graus após a injeção. Esse comportamento pode ser relacionado com a hipótese de que a combustão é um processo infinitamente rápido no modelo simplificado.

### 5.3 Curvas de pressão e taxa de liberação de energia

As Figuras 30 e 31 mostram as curvas de pressão e taxa de liberação de energia das duas simulações e dos dados experimentais. Como a taxa de liberação de energia experimental,

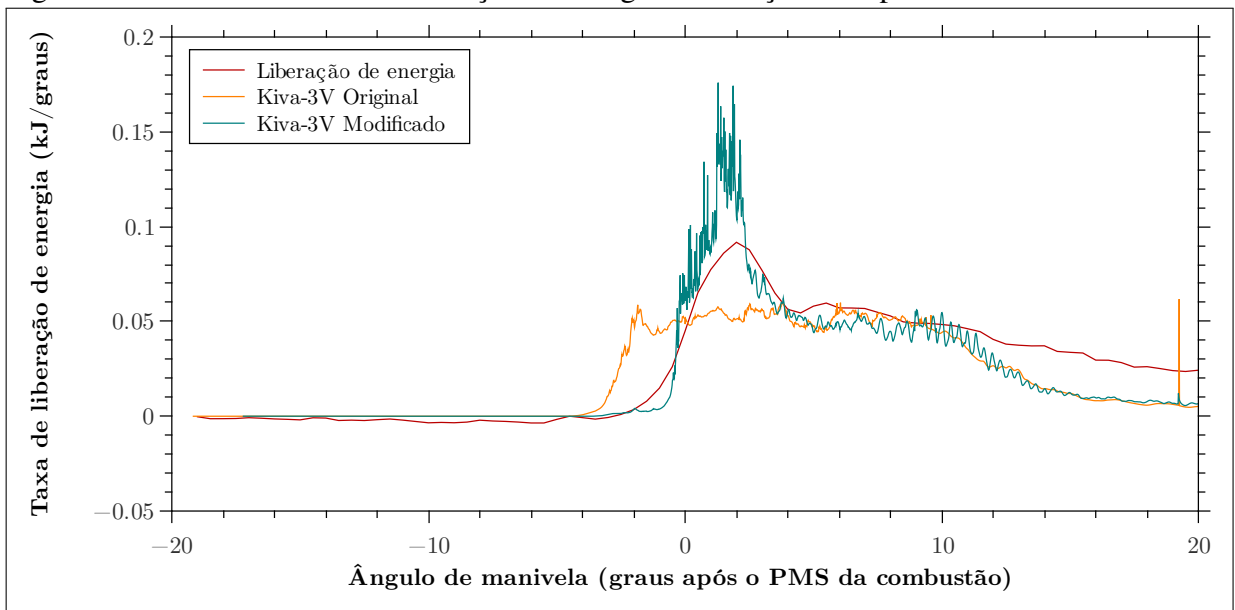
apresentada na Figura 22, teve seus valores normalizados pela energia máxima disponível pelo combustível injetado, a curva experimental foi multiplicada por  $1452 \text{ kJ}$  para a desnormalização dos valores. Este valor é resultado da multiplicação entre o poder calorífico do diesel e n-dodecano,  $44 \text{ MJ}$ , e a massa de combustível injetada,  $33 \text{ mg}$ , mostrado na Tabela 6.

Figura 30 – Curvas de pressão no cilindro: simulações e experimental



Fonte: o autor.

Figura 31 – Curvas de taxa de liberação de energia: simulações e experimental



Fonte: o autor.

A curva de taxa de liberação de energia do modelo com a cinética química simples falha em prever a combustão de acordo com o descrito pela literatura (HEYWOOD, 1988). A

combustão pré-misturada é cortada, sem um pico evidente, como o demonstrado pelos dados experimentais. Além disso, o atraso de ignição foi subestimado, resultando em uma queima aproximadamente 1 grau do ângulo de manivela antes da queima no caso experimental. Neste caso, considerando uma relação linear, a alteração do valor do ângulo de injeção de modo a ajustar a validação resultaria em 3,5 graus antes do PMS, o que fugiria dos parâmetros de funcionamento. Assim como na análise da Figura 29, é possível relacionar tal comportamento com a hipótese de que a combustão ocorre em apenas um passo. A falta de reações que precedem a queima do combustível, como no caso complexo, provoca a combustão a partir do momento em que a energia absorvida pela mistura alcança a energia de ativação, em vez de primeiro passar por um processo de formação de radicais para, só então, ocorrer a ignição de fato.

Já a curva da liberação de energia do modelo com as alterações no *software*, apresenta as duas principais fases da combustão de forma clara. No entanto, o comportamento da combustão pré-misturada não seguiu o mesmo caminho que o caso real, uma vez que o valor do pico da taxa de queima neste período é aproximadamente 50% maior que o experimental. Apesar da posição do pico da taxa de liberação de energia na fase pré-misturada ter coincidido com a do pico experimental, é possível observar que o atraso de ignição foi superestimado, iniciando a queima apenas após meio grau do ângulo de manivela. A coincidência do pico mesmo com a ignição atrasada evidencia que a duração da fase pré-misturada está menor na simulação que no caso real, resultando em uma curva mais estreita.

Uma vez que o ângulo de injeção é um parâmetro com precisão de  $\pm 3$  graus do ângulo de manivela, é possível ajustar a injeção de forma a coincidir o ângulo de ignição sem fugir dos parâmetros de funcionamento do motor. Devido às taxas superestimadas, no entanto, tal alteração deslocaria o pico mais para a esquerda, divergindo do experimental. Neste caso, a aplicação de um modelo de combustão turbulenta poderia ser o fator que ajustaria a curva de forma a fazer os picos coincidirem, uma vez que sua tendência é a frenagem das taxas de progresso, diminuindo o valor absoluto do pico e aumentando a duração da combustão pré-misturada, o que deslocaria o pico mais para a direita.

Durante o período da combustão difusiva, as taxas apresentam valores similares aos experimentais, inclusive com valores menores em algumas regiões da curva. Assim, é possível afirmar que durante esta fase o número de Damköhler é predominantemente baixo, ou seja, a cinética química tem maior relevância que a turbulência nos progressos das reações. Portanto, a utilização de um modelo de combustão turbulenta neste período pode aumentar a discrepância



entre os dados calculados e os experimentais. No entanto, alguns modelos, como o *CTCM* e o *PaSR*, são indiretamente relacionados ao número de Damköhler, uma vez que eles tendem a ser controlados predominantemente pela cinética química quando a escala de tempo laminar é bem maior que a escala de tempo turbulenta.

A partir de 10 graus após o PMS da combustão, as taxas de liberação de energia caem abruptamente, divergindo completamente dos dados experimentais. Essa região corresponde à combustão tardia, descrita por Heywood (1988). Nenhuma das duas versões descreve esta fase de forma correta, subestimando as taxas de progresso.

## 6 CONCLUSÃO

Os três objetivos específicos foram alcançados. O código do Kiva-3V com o modelo de quebra *Blob-KH-RT* foi modificado para a implementação de cinética química complexa, adicionando ao material do laboratório uma versão do *software* que pode ter como arquivo de entrada um mecanismo de reações de cinética química desenvolvido por pesquisadores.

A utilização de um modelo de quebra de gotas que considera mais de um mecanismo de quebra influenciou no jato de diesel a ponto de diminuir o comprimento de quebra em valores menores que 50% em relação ao modelo *TAB*. Como consequência, o processo de mistura de combustível e ar que antecede a combustão ocorreu de forma mais realista, sendo possível comparar as imagens com os esquemas mostrados na literatura.

O objetivo geral também foi alcançado. A implementação da cinética química complexa influenciou significativamente nos resultados. O período do atraso de ignição foi descrito de forma mais realística, uma vez que a absorção de energia pela mistura de combustível e ar inicialmente serviu para a formação de radicais, provocando a ignição apenas após as reações de pré-combustão ocorrerem, diferentemente do modelo original, o qual iniciou a queima de forma antecipada. Foi observado, no entanto, que um modelo que descreve a interação entre a turbulência e a cinética química é necessário em simulações de motores diesel. A combustão pré-misturada apresentou valores superestimados de taxa de liberação de energia, o que poderia ser freado por um modelo de combustão turbulenta. Entretanto, a combustão difusiva apresentou valores similares ao experimental, sendo possível concluir que a cinética química predomina durante esse período. Por isso, o modelo de combustão turbulenta deve levar em consideração a possibilidade de a cinética química governar predominantemente as taxas de progresso, como os modelos *CTCM* e *PaSR*.

Nota-se, portanto, que o aumento na complexidade da cinética química e do processo de quebra de gotas, além de um modelo de combustão turbulenta adequado, são essenciais para a simulação numérica de motores de ciclo diesel.

## REFERÊNCIAS

- ABRAHAM, J.; BRACCO, F.; REITZ, R. Comparisons of computed and measured premixed charge engine combustion. **Combustion and Flame**, v. 60, n. 3, p. 309 – 322, 1985. ISSN 0010-2180.
- AMSDEN, A. A. **Kiva-3V: A Block-Structured KIVA Program for Engines with Vertical or Canted Valves**. New Mexico: Los Alamos National Laboratory, 1997.
- AMSDEN, A. A.; OROURKE, P. J.; BUTLER, T. D. **KIVA-II: A computer program for chemically reactive flows with sprays**. New Mexico: Los Alamos National Laboratory, 1989.
- ARTEMOV, V.; BEALE, S.; DAVIS, G. de V.; ESCUDIER, M.; FUEYO, N.; LAUNDER, B.; LEONARDI, E.; MALIN, M.; MINKOWYCZ, W.; PATANKAR, S.; POLLARD, A.; RODI, W.; RUNCHAL, A.; VANKA, S. A tribute to d.b. spalding and his contributions in science and engineering. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 52, n. 17, p. 3884 – 3905, 2009. ISSN 0017-9310. Special Issue Honoring Professor D. Brian Spalding.
- BAUMGARTEN, C. **Mixture Formation in Internal Combustion Engines**. Berlin: Springer-Verlag, 2006. ISBN 978-3-540-30835-5.
- BENAJES, J.; NOVELLA, R.; PASTOR, J. M.; HERNÁNDEZ-LÓPEZ, A.; KOKJOHN, S. L. Computational optimization of the combustion system of a heavy duty direct injection diesel engine operating with dimethyl-ether. **Fuel**, v. 218, p. 127 – 139, 2018. ISSN 0016-2361. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236118300206>>.
- BORGHI, R. **Reactions chimiques en milieu turbulent**. Tese (Doutorado) — Université Pierre et Marie Curie, Paris, 6 1978.
- BROWN, P. N.; BYRNE, G. D.; HINDMARSH, A. C. Vode: A variable-coefficient ode solver. **SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing**, v. 10, n. 5, p. 1038–1051, 1989. Disponível em: <<https://doi.org/10.1137/0910062>>.
- CHEVRON GLOBAL MARKETING. **Diesel Fuels Technical Review**. San Ramon, 2007. Disponível em: <<https://www.chevron.com/-/media/chevron/operations/documents/diesel-fuel-tech-review.pdf>>.
- DEC, J. E. A conceptual model of di diesel combustion based on laser-sheet imaging\*. In: **International Congress Exposition**. SAE International, 1997. ISSN 0148-7191. Disponível em: <<https://doi.org/10.4271/970873>>.
- ELGAS. **Euro 6 – Australia’s Path to Cleaner Air at No Cost**. 2018. Disponível em: <<http://www.elgas.com.au/blog/1464-euro-6-australia-s-path-to-cleaner-air-at-no-cost>>.
- ELISEO, R.; ALESSIO, F.; ALESSANDRO, S.; MATTEO, P.; ALBERTO, C.; TIZIANO, F. Reduced kinetic schemes of complex reaction systems: Fossil and biomass-derived transportation fuels. **International Journal of Chemical Kinetics**, v. 46, n. 9, p. 512–542, 2014.
- GILKESON, C. **Lecture 2: Governing equations and discretisation schemes**. University of Leeds, 2015. Anotações de aula.

- GLASSMAN, I.; YETTER, R. A.; GLUMAC, N. G. **Combustion**. Quinta edição. Boston: Academic Press, 2015. ISBN 978-0-12-407913-7.
- GOLOVITCHEV, V. I.; NORDIN, N.; JARNICKI, R.; CHOMIAK, J. 3-d diesel spray simulations using a new detailed chemistry turbulent combustion model. In: **SAE Technical Paper**. SAE International, 2000. Disponível em: <<https://doi.org/10.4271/2000-01-1891>>.
- HEYWOOD, J. B. **Internal Combustion Engines Fundamentals**. Nova York: McGraw-Hill, 1988. ISBN 978-0-07-100499-2.
- INSTITUTO BRASILEIRO DO MEIO AMBIENTE E DOS RECURSOS NATURAIS RENOVÁVEIS. **Programa de Controle da Poluição do Ar por Veículos Automotores**. 2011. Disponível em: <[http://www.ibama.gov.br/phocadownload/veiculosautomotores/manual\\_proconve%20promot\\_portugues.pdf](http://www.ibama.gov.br/phocadownload/veiculosautomotores/manual_proconve%20promot_portugues.pdf)>.
- KAMIMOTO, T.; KOBAYASHI, H. Combustion processes in diesel engines. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 17, n. 2, p. 163 – 189, 1991. ISSN 0360-1285. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/036012859190019J>>.
- KAMIMOTO, T.; KOBAYASHI, H.; MATSUOKA, S. A big size rapid compression machine for fundamental studies of diesel combustion. In: **1981 SAE International Off-Highway and Powerplant Congress and Exposition**. SAE International, 1981. ISSN 0148-7191. Disponível em: <<https://doi.org/10.4271/811004>>.
- KEE, R.; RUPLEY, F.; MILLER, J. **Chemkin-II: A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics**. Livermore, 1989. Disponível em: <<https://ntrl.ntis.gov/NTRL/dashboard/searchResults/titleDetail/DE90000917.xhtml>>.
- LAUNDER, B.; SPALDING, D. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, n. 2, p. 269 – 289, 1974. ISSN 0045-7825. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0045782574900292>>.
- LEFEBVRE, A.; MCDONELL, V. **Atomization and Sprays**. Segunda edição. Boca Raton: CRC Press, 2017. ISBN 9781498736268.
- LU, T.; LAW, C. K. Toward accommodating realistic fuel chemistry in large-scale computations. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 35, n. 2, p. 192 – 215, 2009. ISSN 0360-1285.
- MAGNUSSEN, B.; HJERTAGER, B. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. **Symposium (International) on Combustion**, v. 16, n. 1, p. 719 – 729, 1977. ISSN 0082-0784. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0082078477803664>>.
- MUELLER, C. J.; CANNELLA, W. J.; BAYS, J. T.; BRUNO, T. J.; DEFABIO, K.; DETTMAN, H. D.; GIELECIAK, R. M.; HUBER, M. L.; KWEON, C.-B.; MCCONNELL, S. S.; PITZ, W. J.; RATCLIFF, M. A. Diesel surrogate fuels for engine testing and chemical-kinetic modeling: Compositions and properties. **Energy & Fuels**, v. 30, n. 2, p. 1445–1461, 2016. PMID: 27330248. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.5b02879>>.
- MWM INTERNATIONAL MOTORES. **MWM Sprint**: Manual de oficina. São Paulo, 2001. 166 p.

NORDIN, P. A. N. **Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion**. Tese (Doutorado) — Chalmers University of Technology, Gotemburgo, 2001.

PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. New York: Taylor & Francis Group, 1980.

PATTERSON, M. A.; KONG, S.-C.; HAMPSON, G. J.; REITZ, R. D. Modeling the effects of fuel injection characteristics on diesel engine soot and nox emissions. In: **International Congress Exposition**. SAE International, 1994. ISSN 0148-7191. Disponível em: <<https://doi.org/10.4271/940523>>.

PEI, Y.; MEHL, M.; LIU, W.; LU, T.; PITZ, W.; SOM, S. A multicomponent blend as a diesel fuel surrogate for compression ignition engine applications. **Journal of Engineering for Gas Turbines and Power**, v. 137, p. 9, 05122015 2015.

PILCH, M.; ERDMAN, C. Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 13, n. 6, p. 741 – 757, 1987. ISSN 0301-9322. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0301932287900632>>.

POINSOT, T.; VEYNANTE, D. **Theoretical and Numerical Combustion**. Segunda edição. Philadelphia: Edwards, 2005. ISBN 1-930217-10-2.

PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. **Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing**. 3. ed. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2007. ISBN 0521880688, 9780521880688.

SPALDING, D. Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. **Symposium (International) on Combustion**, v. 13, n. 1, p. 649 – 657, 1971. ISSN 0082-0784. Thirteenth symposium (International) on Combustion.

STIESCH, G. **Modeling Engine Spray and Combustion Processes**. Berlin: Springer-Verlag, 2003. ISBN 978-3-662-08790-9.

TAO, F.; GOLOVITCHEV, V. I.; CHOMIAK, J. Self-ignition and early combustion process of n-heptane sprays under diluted air conditions: Numerical studies based on detailed chemistry. In: **SAE Technical Paper**. SAE International, 2000. Disponível em: <<https://doi.org/10.4271/2000-01-2931>>.

VERSTEEG, H.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**. Segunda edição. Harlow: Pearson Education Limited, 2007. ISBN 978-0-13-127498-3.

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

YAO, T.; PEI, Y.; ZHONG, B.-J.; SOM, S.; LU, T.; LUO, K. H. A compact skeletal mechanism for n-dodecane with optimized semi-global low-temperature chemistry for diesel engine simulations. **Fuel**, v. 191, p. 339 – 349, 2017. ISSN 0016-2361. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001623611631184X>>.

ZHOU, D.; YANG, W.; LI, J.; TAY, K. L.; KRAFT, M. Combustion modeling in rcci engines with a hybrid characteristic time combustion and closed reactor model. **Applied Energy**, 2017. ISSN 0306-2619. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261917311534>>.

## APÊNDICE A – SUBROTINA DA IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO PSR

```
1  *deck chem_psr_VODE
2      subroutine chem_psr_VODE(initc, iendc)
3  c
4  c =====
5  c
6  c   Modelo de um reator perfeitamente misturado utilizando o pacote
7  c   VODE para a integracao das EDOs.
8  c
9  c   - yfunc e o vetor com as variaveis integradas, onde:
10 c       yfunc(1:nsp) => concentracoes molares das especies quimicas
11 c       yfunc(nsp+1) => temperatura da celula
12 c
13 c   - vodevec e um vetor de numeros reais passado para o VODE, onde:
14 c       vodevec(1)  => rho medio vezes calor espec. -- ro(i4)*cv(i4)
15 c       vodevec(2:) => vetor trabalho do CHEMKIN-II
16 c
17 c =====
18 c
19       include comkiva.i
20       integer ickwrkdv(30 + (nsp+1) + 1)
21       real rckwrkdv(22 + 9*(nsp+1) + 2*(nsp+1)**2 + 1)
22       real vodevec(cklenr + 1), yfrac(nsp)
23       real, dimension (nsp + 1), target :: yfunc, atol, rtol
24       real, dimension (:), pointer :: conc, conc_atol, conc_rtol
25       real, pointer :: temp1, temp_atol, temp_rtol
26       external chmkin
27       ! Assinalando os ponteiros aos vetores:
28       conc       => yfunc(1:nsp)
29       conc_atol => atol (1:nsp)
30       conc_rtol => rtol (1:nsp)
31       temp1      => yfunc(nsp + 1)
32       temp_atol => atol (nsp + 1)
33       temp_rtol => rtol (nsp + 1)
34 c
35 c <><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><><>
36 c
37
38 ! --- Parametros de trabalho e convergencia do VODE -----
39       itask = 1; itol = 4; iopt = 0; mmf = 22
40       conc_rtol = 1.d-09      ! Tolerancia relativa para as concentracoes
41       conc_atol = 1.d-20      ! Tolerancia absoluta para as concentracoes
42       temp_rtol = 1.d-09      ! Tolerancia relativa para as temperatura
43       temp_atol = 1.d-20      ! Tolerancia absoluta para as temperatura
44       nspp1 = nsp + 1        ! Numero de EDOs (nsp + 1 > nspp1)
45       lenrdv = 22 + 9*nspp1 + 2*nspp1**2
46       lenidv = 30 + nspp1
47       call xsetfdv(0)
```







## ANEXO A – FLUXOGRAMA DO FUNCIONAMENTO DO KIVA-3V

As páginas 58 e 59 do manual do Kiva-II (AMSDEN *et al.*, 1989), uma versão anterior ao Kiva-3V, apresenta um fluxograma do funcionamento do código fonte original do *software* em inglês. Ao longo de desenvolvimento de novas versões, modificações foram realizadas, além das alterações devido a este trabalho.

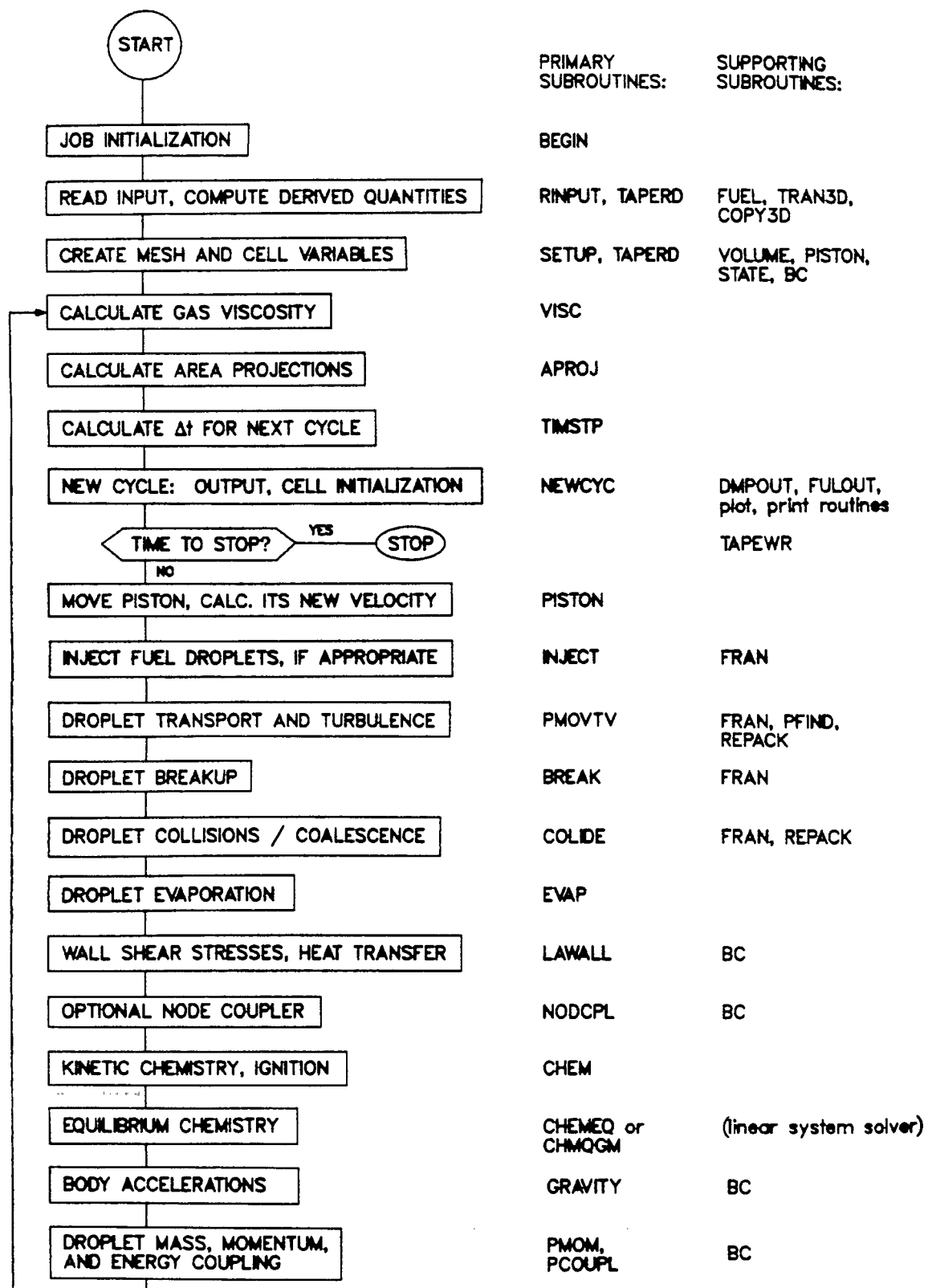


Fig. 8. General flow diagram for the KIVA-II program.

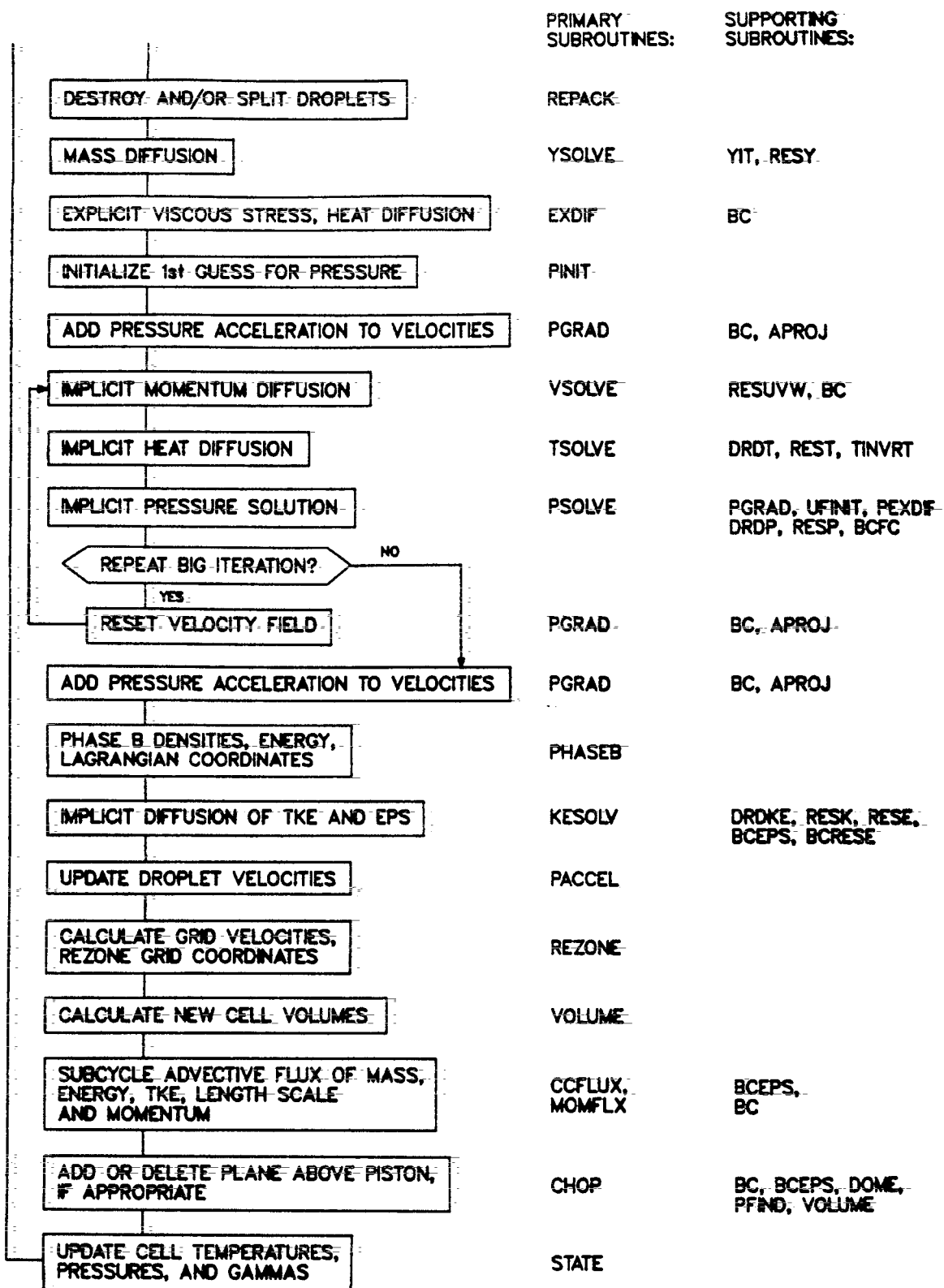


Fig. 8. continued