

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA**

Yesid Ortiz Sánchez

**MODELAGEM E ANÁLISE NUMÉRICA DA
COMBUSTÃO DE ÓLEO VEGETAL *IN-NATURA*
EM MOTORES A COMBUSTÃO INTERNA DE
IGNIÇÃO POR COMPRESSÃO**

Florianópolis
2017

Yesid Ortiz Sánchez

**MODELAGEM E ANÁLISE NUMÉRICA DA
COMBUSTÃO DE ÓLEO VEGETAL *IN-NATURA*
EM MOTORES A COMBUSTÃO INTERNA DE
IGNIÇÃO POR COMPRESSÃO**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Amir Antônio Martins de Oliveira Jr., Ph.D.

Coorientador: Prof. Leonel Rincón Cancino, Dr. Eng.

Florianópolis

2017

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Ortiz Sánchez, Yesid

Modelagem e análise numérica da combustão de óleo vegetal in natura em motores a combustão interna de ignição por compressão / Yesid Ortiz Sánchez ; orientador, Amir Antônio Martins de Oliveira Jr., coorientador, Leonel Rincón Cancino, 2017.
242 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico, Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica, Florianópolis, 2017.

Inclui referências.

1. Engenharia Mecânica. 2. Mistura de óleo de soja in natura e óleo diesel. 3. Motores de ignição por compressão. 4. Simulação numérica. 5. Biocombustíveis. I. Martins de Oliveira Jr., Amir Antônio. II. Rincón Cancino, Leonel. III. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. IV. Título.

Yesid Ortiz Sánchez

**MODELAGEM E ANÁLISE NUMÉRICA DA COMBUSTÃO DE
ÓLEO VEGETAL *IN-NATURA* EM MOTORES A COMBUSTÃO
INTERNA DE IGNIÇÃO POR COMPRESSÃO**

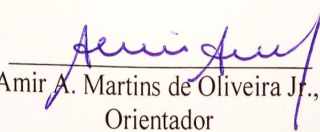
Esta Tese foi julgada adequada para obtenção do Título de “Doutor em Engenharia Mecânica”, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica.

Florianópolis, 17 de novembro de 2017.



Prof. Jonny Carlos da Silva, Dr.Eng.

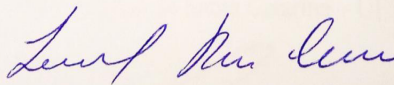
Coordenador do programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica –
POSMEC/UFSC



Prof. Amir A. Martins de Oliveira Jr., Ph.D.

Orientador

Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC

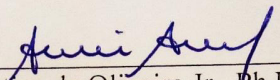


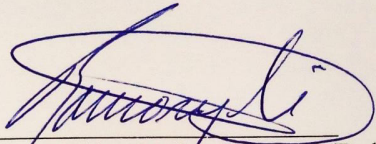
Prof. Leonel Rincón Cancino, Dr. Eng.

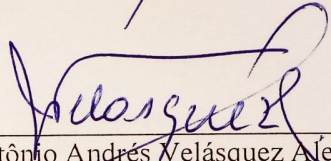
Coorientador

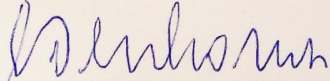
Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC

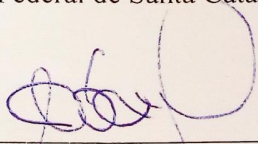
Banca Examinadora:

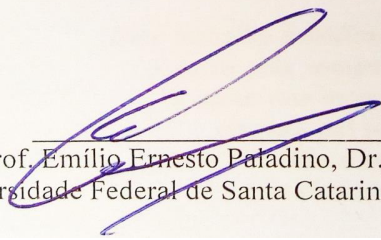

Prof. Amir A. Martins de Oliveira Jr., Ph.D. (Presidente)
Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC


Prof. Ramón Molina Valle, Dr. Eng. (Relator)
Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG


Prof. José Antônio Andrés Velásquez Alegre, Dr. Eng.
Universidade Tecnológica Federal do Paraná – UTFPR


Prof. César José Deschamps, Ph.D.
Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC


Prof. Edson Bazzo, Dr.Eng.
Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC


Prof. Emílio Ernesto Paladino, Dr. Eng.
Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC

*Este trabalho é dedicado a minha esposa
Sandra pela companhia, compreensão
e apoio nos momentos de incerteza,
ao meu pai pelo seu exemplo de
vida e seu amor, aos meus
irmãos pelo apoio constante.*

AGRADECIMENTOS

A realização deste trabalho de doutorado teve a colaboração de muitas pessoas importantes que foram motivadoras em todos os momentos para atingir este objetivo final.

Eu quero agradecer especialmente ao Prof. Amir Antônio Martins de Oliveira pela oportunidade de trabalhar a seu lado e pelo seu dom e capacidade de ensino da ciência. Agradeço ao Prof. Leonel Ricón Cancino pela sua paciência e todas suas sugestões no desenvolvimento deste trabalho. Um agradecimento especial aos professores integrantes do LABCET, Prof. Edzon Bazzo por sua motivação constante e por formar parte da banca examinadora e Prof. Vicente de Paulo Nicolau que direta ou indiretamente contribuiu de alguma forma.

Igualmente quero agradecer aos membros da banca examinadora Prof. Ramón Molina, Prof. Jose Antônio Velasquez, Prof. Emilio Paladino e Prof. César Deshamps por aceitar ler a tese e pelas sugestões para melhorar o documento final.

Agradeço aos meus colegas do LABCET por compartilhar momentos de trabalho e momentos de conversa em que passei o dia a dia do meu tempo neste local acadêmico. Aos meus amigos colombianos Renzo, Nury, Juan Pablo, Gonzalo, Nathaly, Jair, Diego, Jeison e Sergio por sua companhia, ajuda e pelos momentos de constante conversa e motivação. Um especial agradecimento aos amigos brasileiros que deram a minha esposa e a mim, uma acolhida carinhosa e nos trataram como sua família, especialmente nossos vizinhos e membros da Vidativa da UFSC.

À Universidade Tecnológica de Pereira que com seu apoio econômico e institucional, facilitou o processo de estudo de doutorado. Aos colegas professores da Escola de Tecnologia Mecânica da UTP por sua compreensão e motivação.

Um agradecimento ao meu Pai por seu apoio e compreensão até seu último momento, a minha esposa Sandra por compartilhar todos esses momentos no Brasil e aos meus irmãos pelo suporte moral constante.

RESUMO

O funcionamento dos motores de ignição por compressão envolve vários fenômenos complexos, incluindo escoamentos turbulentos, transferência de calor e massa, injeção de combustível, atomização, evaporação, ignição e combustão. Esses fenômenos são caracterizados por uma grande variedade de escalas espaciais e temporais, desde as escalas de tempo rápidas da combustão até as escalas de tempo relativamente lentas do movimento do pistão, assim como tamanho de gotículas e vórtices turbulentos pequenos e distâncias de deslocamento do pistão. O uso de combustíveis alternativos nos motores atuais enfrenta as limitações impostas pelos atuais projetos de motores, que evoluíram ao longo dos anos e tornaram-se otimizados para o combustível diesel. Os óleos vegetais *in natura* (SVO) podem ser usados diretamente em motores de ignição por compressão, permitindo uma redução significativa nos custos e impactos do ciclo de vida relacionados ao processamento de combustível. No entanto, as grandes diferenças entre as propriedades termofísicas e termoquímicas dos SVO quando comparadas ao diesel exigem novos conhecimentos sobre a projeto e operação do motor, a fim de alcançar eficiência e operação confiável, a longo prazo. Uma das possibilidades de uso dos SVO é a mistura com combustível diesel e aquecimento antes da injeção. Este trabalho aborda as características da operação do motor com o SVO comparativamente àquelas da operação com óleo diesel. Para isso, foi realizada uma simulação de mecânica de fluidos multidimensional e dos fenômenos de transporte de um motor de ignição por compressão, de 4 tempos, monocilíndrico, aspirado naturalmente, injeção mecânica e taxa de compressão de 17,3, operando com óleo diesel puro (100d) e com uma mistura de 80% de óleo vegetal de soja *in natura* e 20% de óleo diesel (80s20d). As equações de conservação para massa da mistura, massa de espécies, quantidade de movimento e energia, utilizando um modelo RANS para o escoamento turbulento, foram resolvidas no software CONVERGE, permitindo o movimento do pistão e válvula, admissão, compressão, injeção, atomização e combustão, nas velocidades do motor de 1800 e 2100 rpm. A análise foi dividida em três partes. A primeira explora a admissão e compressão de gás. A geometria do

coletor de admissão e o movimento da válvula de admissão foram obtidos para o motor real. Foi utilizado o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ de Renormalização do Grupo (RNG). Os resultados apresentam os campos de pressão, temperatura, velocidade, energia cinética turbulenta e taxa de dissipação de energia cinética turbulenta ao longo da admissão e compressão, com foco na determinação das condições de escoamento antes da injeção de combustível. Foram obtidos coeficientes de descarga globais de 0,51 e 0,55 para 1800 rpm e 2100 rpm, levando a eficiências volumétricas de 0,78 e 0,77 a 1800 rpm e 2100 rpm, respectivamente. Os resultados indicaram que a razão do *swirl* atingiu um valor máximo de 2,05 no ângulo de início da injeção, para ambas as velocidades do motor, como resultado do *squish* produzido pela forma do pistão. A razão de *tumble*, no entanto, atingiu seu valor máximo de 1,8 a 290° antes do TDC, 120° antes do fechamento da válvula de admissão, diminuindo para -0,2 no início da injeção. No início da injeção, a temperatura e pressão média de gás no cilindro são 961 K e 3,15 MPa a 1800 rpm e 969 K e 3,16 MPa a 2100 rpm. A temperatura e a pressão no cilindro foram comparadas com dados experimentais e com resultados de modelagem zero-dimensional, respectivamente apresentando boa concordância. Na segunda parte, foi feita a simulação usando modelos de injeção e atomização de combustível desde o início da injeção em 20° antes de TDC até 120° após TDC. O foco desta análise é comparar o spray da mistura (80s20d) com o combustível diesel puro (100d). O óleo diesel é modelado como n-dodecano ($C_{12}H_{26}$). As propriedades termofísicas do óleo diesel e da mistura foram medidas e correlacionadas com a temperatura. Usando as correlações, verifica-se que quando a mistura de combustível é aquecida a $85^\circ C$ antes da injeção, seu regime de quebra é um regime de atomização, similar ao óleo diesel conforme o diagrama de Ohnesorge. Um injetor com cinco orifícios foi modelado. A posição, comprimento e diâmetro dos orifícios foram medidos usando tomografia. Foi assumido um perfil de injeção de chapéu e a massa de combustível injetada por ciclo foi medida para cada combustível na velocidade do motor. A fase gasosa é modelada em uma estrutura euleriana e a fase líquida em uma estrutura lagrangiana. Foram utilizados o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ RNG, a equação de estado de Redlich-Kwong para a fase gasosa, o algoritmo PISO para o acoplamento velocidade-pressão e um método *multi-gríd*. A quebra primária foi modelada com o modelo blob, quebra secundária com o modelo KH-RT, modelo O-Rourke para dispersão turbulenta, Frossling para vaporização de gotículas, Ranz-Marshall para transferência de calor e massa, o modelo de colisão NTC e

um refinamento de malha adaptativa. Os resultados indicaram que a mistura 80s20d apresenta penetração de líquido 1,05 vezes maior do que o diesel, início da penetração de vapor 0,04 ms mais tarde e 1,23 vezes maior de SMD máximo e mínimo. Essas diferenças afetarão fortemente a formação da mistura e a ignição. Na terceira parte analisou a formação da mistura e a combustão. A simulação começa em 20° antes do TDC e termina em 360°, no fechamento da válvula de escape. O modelo de turbulência $k - \varepsilon$ RNG é usado para resolver quantidade de movimento, o calor e a transferência de massa, enquanto se utiliza um modelo reduzido de cinética química para n-dodecano com 106 espécies e 420 reações, resolvidas para cada célula no domínio computacional, para modelar as reações. O óleo de soja é modelado como uma fase líquida com menor pressão de saturação quando comparado ao combustível diesel. No entanto, uma vez em fase de vapor, é modelado como n-dodecano. O modelo estendido de Zeldovich é usado para prever a formação de NOx e o modelo de Hiroyasu é usado para prever a formação de fuligem. A pressão média no cilindro é comparada com as medições realizadas no mesmo motor e condições de operação. Os resultados indicaram desvios máximos na pressão máxima de 0,5% para o diesel e 1,0% para a mistura. A temperatura média no cilindro é comparada aos resultados de um modelo zero-dimensional. Enquanto a temperatura máxima permanece dentro de 1%, o modelo tridimensional completo prevê uma queda mais lenta da temperatura no curso de expansão. Em particular, o modelo permitiu verificar a posição e o tempo em que ocorre a ignição, bem como o desenvolvimento detalhado das fases pré-misturadas e não pré-misturadas. O atraso da ignição foi estimado como o tempo para atingir metade do aumento de temperatura total causado pela combustão no domínio computacional. Esta definição é comparada à derivada máxima na curva de fração molar média de OH no cilindro, obtida nas simulações e também ao ponto de inflexão da curva de pressão medida no motor operando nas mesmas condições. O tempo de atraso da ignição é aproximadamente 0,5° menor para a mistura. A razão para isso foi que a maior temperatura da mistura injetada fornece uma rápida evaporação e mistura da fração de óleo diesel, tanto por causa da maior pressão de vapor quanto pelo menor calor latente, levando a uma ignição mais rápida na região pré-misturada. A estrutura da chama revelou a molhagem extensa das paredes do pistão durante a fase final da combustão. A emissão de fuligem foi menor, mas o NOx foi maior para a mistura. Os valores integrados do ciclo indicaram um ganho de potência indicada de 1,6% e um ganho de eficiência

de conversão de combustível indicada de 2% a menor velocidade e 3% a maior velocidade. Em geral, a simulação numérica permitiu uma análise relativamente rápida e detalhada dos principais fenômenos que determinam a combustão de misturas de óleo de soja e óleo diesel em motores de ignição por compressão. O modelo pode ser usado como uma primeira avaliação de otimização no projeto e operação do motor.

Palavras-chave: Mistura de óleo de soja *in natura* e óleo diesel. Motores de ignição por compressão. Simulação numérica. Biocombustíveis.

ABSTRACT

The operation of compression ignition engines involves several complex flow and transport phenomena, including turbulent mass exchanges, fuel injection, atomization, evaporation, ignition, and combustion. These phenomena are characterized by a large range of spatial and time scales, from the fast combustion time scales, to the relatively slow piston motion time scales, and from the size of the smallest droplets and turbulent eddies, to the displacement length of the engine. The use of alternative fuels in current engines faces the limitations imposed by the current engine designs, which evolved along the years and became optimized to diesel fuel. Straight vegetable oils (SVO) can be used directly in compression ignition engines, allowing for a significant reduction in costs and life cycle impacts related to fuel processing. However, the large differences between the thermophysical and thermochemical properties of SVO when compared to diesel fuel requires new insights into the engine design and operation in order to achieve efficiency and reliable, long term, operation. One of the possibilities to the use of SVO is the blending with diesel fuel and heating prior to injection. This work addresses the characteristics of the engine operation with SVO comparatively to those of the operation with diesel oil. For this, a multidimensional fluid mechanics and transport simulation of a 4-stroke, single cylinder, naturally aspirated, mechanically injected, compression ignition engine, with a compression ratio of 17,3, operating with pure diesel oil (100d) and with a blend of 80% straight soybean oil and 20% diesel oil (80s20d) was performed. The conservation equations for mass of the mixture, mass of species, linear momentum, and energy, employing a RANS model for the turbulent flow, were solved in the software CONVERGE, allowing for piston and valve motion, intake, compression, injection, atomization, and combustion, in the engine speeds of 1800 and 2100 rpm. The analysis was divided in three parts. The first explores the gas intake and charge compression. The geometry of the intake runner and intake valve motion were obtained for the current engine. The Renormalization Group (RNG) $k - \varepsilon$ turbulent model was used. The results present the fields of pressure, temperature, velocity, turbulent kinetic energy and

rate of dissipation of turbulent kinetic energy along admission and compression, with a focus to determine the flow conditions prior to fuel injection. Overall discharge coefficients of 0,51 and 0,55 were obtained for 1800 rpm and 2100 rpm, leading to volumetric efficiencies of 0,78 and 0,77 at 1800 rpm and 2100 rpm, respectively. The results indicated that the swirl ratio reached a maximum value of 2,05 at the angle of start of injection, for both engine speeds, as a result of squish produced by the piston bowl shape. The tumble ratio, however, achieved its maximum value of 1,8 at 290° before TDC, 120° before intake valve closing, drooping to -0,2 at start of injection. At start of injection, the cylinder averaged gas temperature and pressure are 961 K and 3,15 MPa at 1800 rpm and 969 K and 3,16 MPa at 2100 rpm. The temperature and pressure in the cylinder were compared to measurements in the engine reaching a good agreement. The second part, models fuel injection and atomization from start of injection at 20° before TDC to 120° after TDC. The focus of this analysis is to compare the spray evolved from the blend (80s20d) to the pure diesel fuel (100d). Diesel oil is modeled as n-dodecane ($C_{12}H_{26}$). The thermophysical properties of both the diesel oil and the blend were measured and correlated with temperature. Using the correlations, it is verified that when the fuel mixture is heated to $85^\circ C$ prior to injection, the blend approaches the diesel fuel in the atomization regime in the Ohnesorge spray regime diagram. An injector with five orifices is modeled. The position, length and diameter of the orifices were measured using tomography. A top hat injection profile was assumed and the mass of fuel injected per cycle was measured for each fuel and engine speed. The gas phase is modeled in an eulerian frame of reference and the liquid phase in a lagrangian frame of reference. The RNG $k - \varepsilon$ turbulent model, the Redlich-Kwong equation of state for the gas phase, the PISO algorithm for the pressure-velocity coupling and a multigrid method were used. Primary break-up was modeled with the blob model, secondary break-up with the KH-RT model, O-Rourke model for turbulent dispersion, Frossling for droplet vaporization, Ranz-Marshall for heat and mass transfer, the NTC collision model and an adaptive mesh refinement. The results indicated that the 80s20d mixture presents liquid penetration 1,05 times longer than the diesel, start of vapor penetration 0,04 ms later, and 1,23 times larger maximum and minimum SMD. These differences will strongly affect mixture formation and ignition. The third part analyzed the mixture formation and combustion. The simulation starts at 20° before TDC and ends at 360° , at exhaust valve closing. The

RNG $k - \varepsilon$ turbulent model is used to solve for momentum, heat and mass transfer, while a reduced chemical kinetics model for n-dodecane with 106 species and 420 reactions, solved for every cell in the computational domain, is used to model the reactions. The soybean oil is modeled as a liquid phase with a lower saturation pressure when compared to diesel fuel. However, once in vapor phase, it is modeled as n-dodecane. The extended Zeldovich model is used to predict the formation of NOx and Hiroyasu model is used to predict the formation of soot. The predicted average pressure in the cylinder is compared to measurements taken in the same engine and operation conditions. The results indicated maximum deviations in the maximum pressure of 0,5% for the diesel fuel and 1,0% for the mixture. The predicted average temperature in the cylinder is compared to the results of a zeroth-dimensional model. While the maximum temperature remains within 1%, the full three-dimensional model predicts a slower decay of temperature in the expansion stroke. In particular, the model allowed to verify the position and time where ignition occurs, as well as, the detailed development of the premixed and non-premixed phases. The ignition delay time was estimated as the time to reach half the total temperature increase caused by combustion. This definition compared well to the maximum derivative in the cylinder-averaged OH mole fraction curve, taken from the simulations, and also to the inflection point of the transient pressure curve measured for the engine operating at the same conditions. The ignition delay time is approximately 0,5° smaller for the mixture. The reason for this was that the higher temperature of the injected mixture provided a faster evaporation and mixing of the diesel oil fraction, both because of the higher vapor pressure and the lower latent heat, leading to a faster ignition in the premixed region. The flame structure revealed the extensive wetting of the piston walls during the late combustion phase. Soot emission was lower, but NOx was higher for the mixture. Cycle integrated values indicated a gain of indicated power of 1,6% and a gain of indicated fuel conversion efficiency of 2% at lower speed and 3% at higher speed. Overall, the numerical simulation allowed for a relatively fast and detailed analysis of the main phenomena determining the combustion of straight soybean and diesel oil blends in compression ignition engines. The model can be further used as a first evaluation of optimization in engine design and operation.

Keywords: Straight soybean and diesel oil blends. Compression ignition engines. Numerical simulation. Biofuels.

LISTA DE FIGURAS

| | |
|---|----|
| Figura 1 – Esquema mostrando a geometria básica e dimensões principais do conjunto cilindro, pistão e manivela. (Fonte Autor) | 47 |
| Figura 2 – Diagrama $p - v$ do ciclo ideal diesel. (Fonte: Autor) | 50 |
| Figura 3 – Processos de formação de mistura e combustão em motores diesel. (Adaptado de (Merker <i>et al.</i> , 2009)) | 53 |
| Figura 4 – Fórmulas estruturais e representação gráfica de parafinas, oleofinas e acetilênicos. (Adaptado de (Merker <i>et al.</i> , 2009)) | 55 |
| Figura 5 – Fórmulas estruturais e representação gráfica de naftenos e aromáticos. (Adaptado de (Merker <i>et al.</i> , 2009)) | 55 |
| Figura 6 – Processos do ciclo do motor de 4 tempos. a) Admissão. b) Compressão. c) Expansão. d) Exaustão. (Fonte: Autor) | 64 |
| Figura 7 – Mecanismos de transferência de calor no motor. (Adaptado de (Heywood, 1988)) | 65 |
| Figura 8 – a) <i>Swirl</i> . b) <i>Tumble</i> . (Fonte: Autor) | 66 |
| Figura 9 – Geometria tridimensional para simulação. (Fonte: Autor) | 80 |
| Figura 10 – Tomografia do injetor. (Fonte: LMPT) | 80 |
| Figura 11 – Pressão máxima em função do ângulo de manivela para três tamanhos de malha usados. (Fonte: Autor) | 83 |
| Figura 12 – Energia cinética turbulenta em função do ângulo de manivela para três tamanhos de malha usados. (Fonte: Autor) | 84 |
| Figura 13 – Elevação das válvulas e coeficiente de descarga. (Fonte: Autor) | 89 |
| Figura 14 – Vazão de massa na admissão. a) 1800 rpm, b) 2100 rpm. (Fonte: Autor) | 90 |

| | |
|--|-----|
| Figura 15 – Velocidade do escoamento na admissão. a) Haste da válvula 1800 rpm, b) Haste da válvula 2100 rpm, c) No cilindro 1800 rpm, d) No cilindro 2100 rpm. (Fonte: Autor) | 92 |
| Figura 16 – Vetores de velocidade do escoamento no cilindro no ângulo de -271° . a) Plano xy, b) Plano yz. (Fonte: Autor) | 93 |
| Figura 17 – Pressão no duto de admissão em função do ângulo de virabrequim. (Fonte: Autor) | 93 |
| Figura 18 – Velocidade do escoamento na válvula de admissão em função do ângulo de manivela. (Fonte: Autor) | 94 |
| Figura 19 – Razão de <i>swirl</i> e razão de <i>tumble</i> em função do ângulo de manivela. (Fonte: Autor) | 95 |
| Figura 20 – Vetores de velocidade no cilindro em torno do eixo z em planos a 13 mm e 75 mm do cabeçote. a) e b) em 1800 rpm, c) e d) em 2100 rpm (Fonte: Autor) | 96 |
| Figura 21 – Vetores de velocidade na compressão, 20° antes do PMS. a) Plano yz, b) Plano xy (Fonte: Autor) | 97 |
| Figura 22 – a) TKE média, b) ESP média no cilindro em função do ângulo de manivela. (Fonte: Autor) | 98 |
| Figura 23 – Contornos de pressão no cilindro em -271° . a) 1800 rpm, b) 2100 rpm. (Fonte: Autor) | 99 |
| Figura 24 – a) Pressão média no cilindro, b) Temperatura média no cilindro em função do ângulo de manivela. (Fonte: Autor) | 100 |
| Figura 25 – Contornos de temperatura no cilindro em -271° . a) 1800 rpm, b) 2100 rpm (Fonte: Autor) | 101 |
| Figura 26 – Classificação do modo de desintegração. (Adaptado de (Baumgarten, 2006)) | 111 |
| Figura 27 – Forma dos jatos para cada regime de quebra. (Adaptado de (Baumgarten, 2006)) | 111 |
| Figura 28 – Possíveis trajetórias da partícula em um escoamento turbulento. (Adaptado de (Stiesch, 2003)) | 114 |
| Figura 29 – Modelo de Quebra Analogia de Taylor. (Adaptado de (Baumgarten, 2006)) | 122 |
| Figura 30 – Modelo de quebra de Kelvin-Helmholtz. (Adaptado de (Baumgarten, 2006)) | 123 |
| Figura 31 – Modelo de quebra de Rayleigh-Taylor. (Adaptado de (Baumgarten, 2006)) | 125 |
| Figura 32 – Parâmetros de colisão. (Adaptado de (Baumgarten, 2006)) | 126 |

| | |
|--|-----|
| Figura 33 – Evaporação de gota de combustível líquido em ambiente quiescente. (Adaptado de (Turns, 2000)) | 129 |
| Figura 34 – Propriedades dos combustíveis em função de T. a) Massa específica, b) Viscosidade dinâmica. (Fonte: autor) | 139 |
| Figura 35 – Propriedades dos combustíveis em função de T. a) Tensão superficial, b) Condutividade térmica. (Fonte: autor) | 140 |
| Figura 36 – Propriedades dos combustíveis em função de T. a) Pressão de vapor, b) Entalpia de vaporização, c) Calor específico. (Fonte: autor) | 142 |
| Figura 37 – a) Geometria tridimensional para simulação de spray e evaporação. b) Identificação dos cinco (5) jatos do injetor. (Fonte: autor) | 148 |
| Figura 38 – Diagrama de Ohnesorge para os combustíveis em 1800 rpm. (Fonte: autor) | 150 |
| Figura 39 – a) Penetração de líquido, b) Penetração de vapor em função do ângulo de manivela para o motor em 1800 rpm e três tamanhos de malha base. (Fonte: autor) | 154 |
| Figura 40 – Penetração de spray em função do tempo ASOI. a) em 1800 rpm, b) em 2100 rpm. Na notação $LiqX$, X é o número do jato, e o número 1 e 2 ao final representa a simulação com mistura não aquecida e aquecida respectivamente (Fonte: autor) | 157 |
| Figura 41 – a) Penetração de vapor jato 1 em função do tempo ASOI, b) Velocidade de injeção (Fonte: autor) | 158 |
| Figura 42 – Evolução da forma dos jatos no tempo, para <i>2100 rpm</i> . (Fonte: autor) | 160 |
| Figura 43 – Número de Stoke em função do tempo ASOI, para <i>1800 rpm</i> . (Fonte: autor) | 161 |
| Figura 44 – Penetração de vapor no jato 0 e no jato 1 para 0,83 ms ASOI. (Fonte: autor) | 162 |
| Figura 45 – Massa de combustível líquido e vapor em função do ângulo de manivela. a) em 1800 rpm, b) em 2100 rpm. (Fonte: autor) | 164 |
| Figura 46 – Diâmetro médio sauter e número de gotas em função do ângulo de manivela. a) 1800 rpm, b) 2100 rpm. (Fonte: autor) | 165 |
| Figura 47 – Vetores de velocidade da gota para o jato 1 em $-6,2^\circ$. (Fonte: autor) | 167 |

| | |
|--|-----|
| Figura 48 – Velocidade de gota dos combustíveis reduzida em 20% para o jato 1 em $-6,2^\circ$. (Fonte: autor) | 169 |
| Figura 49 – Raio de gota para o jato 1 em $-6,2^\circ$ para o diesel a para a mistura 80s20d. (Fonte: autor) | 170 |
| Figura 50 – Fases de combustão em um motor diesel. (Adaptado de (Heywood, 1988)) | 178 |
| Figura 51 – Relações de fluxo massa na superfície da chama. (Adaptado de (Turns, 2000)) | 181 |
| Figura 52 – Diagrama de regimes de combustão turbulenta pré-misturada. (Adaptado de (Peters, 2000)) | 187 |
| Figura 53 – Diagrama de regimes de combustão turbulenta pré-misturada. (Adaptado de (Peters, 2000)) | 196 |
| Figura 54 – a) Penetração do líquido, b) Penetração de vapor em função do ângulo de manivela para o motor em 1800 rpm e três malha base. (Fonte: Autor) | 206 |
| Figura 55 – Pressão média no interior do cilindro em função do ângulo de manivela. a) Para 1800 rpm, b) Para 2100 rpm. (Fonte: Autor) | 208 |
| Figura 56 – Temperatura média no interior do cilindro em função do ângulo de manivela. a) Para 1800 rpm, b) Para 2100 rpm. (Fonte: Autor) | 210 |
| Figura 57 – Para o jato 1 em diferentes ângulos de manivela. a) Perfil de temperatura. b) Perfil de fração de mistura. (Fonte: Autor) | 211 |
| Figura 58 – Taxa de liberação de calor multidimensional e zero dimensional em função do ângulo de manivela. a) Para 1800 rpm, b) Para 2100 rpm. (Fonte: Autor) | 213 |
| Figura 59 – Taxa de liberação de calor numérica e zero dimensional em função do ângulo de manivela. a) Para 1800 rpm, b) Para 2100 rpm. (Fonte: Autor) | 214 |
| Figura 60 – Massa de combustível líquido e vapor em função do ângulo de manivela. a) Para 1800 rpm. b) Para 2100 rpm. (Fonte: Autor) | 215 |
| Figura 61 – Pontos de ignição em três jatos de combustível. (Fonte: Autor) | 219 |
| Figura 62 – Contornos de temperatura e de OH para dois jatos de combustível em $-3,0^\circ$. (Fonte: Autor) | 219 |
| Figura 63 – Contornos de $Y_{C_{12}H_{26}}$, razão de equivalência, Y_{O_2} , Y_{CO} , Y_{OH} , fuligem e NO_x para o jato 1 do diesel e mistura 80s20d para 1800 rpm e $-3,0^\circ$. (Fonte: Autor) | 220 |

| | |
|--|-----|
| Figura 64 – Distribuição de temperatura no cilindro em dois ângulos para diesel e mistura 80s20d em 1800 rpm. (Fonte: Autor) | 221 |
| Figura 65 – a) Geração de fuligem. b) Geração de NOx em função do ângulo de manivela. (Fonte: Autor) . . | 223 |
| Figura A. 1–Secção da geometria do motor na simulação de transferência de calor. (Fonte: Autor) | 238 |
| Figura A. 2–(a) Temperatura média na região sólida. (b) Temperatura no sólido na interface sólido/fluido. (Fonte: Autor) | 241 |

LISTA DE TABELAS

| | | |
|-----------|--|-----|
| Tabela 1 | – Casos simulados e suas características. (Fonte: Autor) | 43 |
| Tabela 2 | – Descrição dos processos no motor de combustão interna de 4 tempos de ignição por compressão | 46 |
| Tabela 3 | – Requisitos para Óleos Diesel ASTM D 975 (Adaptado de (Corporation, 2007)) | 58 |
| Tabela 4 | – Propriedades técnicas do biodiesel (Adaptado de (Demirbas, 2008)) | 60 |
| Tabela 5 | – Propriedades de combustível D2 e óleos vegetais. (Adaptado de (Demirbas, 2008)) | 62 |
| Tabela 6 | – Especificação do motor. (Fonte: Autor) | 79 |
| Tabela 7 | – Intervalos de tempo de simulação. (Fonte: Autor) | 81 |
| Tabela 8 | – Massa de gás no cilindro e eficiência volumétrica por ciclo. (Fonte: Autor) | 91 |
| Tabela 9 | – Resumo de resultados obtidos de razão de <i>swirl</i> , razão de <i>tumble</i> , energia cinética turbulenta, taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, pressão e temperatura. (Fonte: Autor) | 102 |
| Tabela 10 | – Temperatura do combustível. (Fonte: Autor) | 150 |
| Tabela 11 | – Propriedades dos combustíveis na temperatura de injeção. (Fonte: Autor) | 151 |
| Tabela 12 | – Penetração do líquido em [mm] no jato 2 para diferentes tempos ASOI. (Fonte: Autor) | 159 |
| Tabela 13 | – Tamanho de gota numérico e tamanho obtido da correlação dada pela equação 4.1 para diesel e mistura 80s20d. (Fonte: Autor) | 167 |
| Tabela 14 | – Redução da velocidade axial do jato 1 em $-6,2^\circ$ para o diesel e para a mistura 80s20d. (Fonte: Autor) | 168 |
| Tabela 15 | – Temperatura de ignição e atraso de ignição para diesel e para mistura 80s20d. (Fonte: Autor) | 218 |
| Tabela 16 | – Parâmetros indicados de desempenho e eficiência do motor. (Fonte: Autor) | 224 |
| Tabela 17 | – Parâmetros desempenho de freio e de eficiência do motor. (Fonte: Autor) | 224 |

LISTA DE SÍMBOLOS E ABREVIATURAS

Letras romanas

| | | |
|-----|--|-----------------------------------|
| e | Energia interna específica | [J/kg] |
| g | Aceleração da gravidade | [m/s ²] |
| K | Condutividade térmica | [W/m K] |
| k | Energia cinética turbulenta | [m ² /s ²] |
| p | Pressão | [Pa] |
| R | Constante universal dos gases | [J/mol K] |
| u | Velocidade instantânea do escoamento | [m/s] |
| W | Massa molar | [kg/kmol] |
| Z | Fração de mistura | [kg/kg] |
| z | Elevação em relação a um nível de referência | [m] |

Símbolos gregos

| | | |
|---------------|--|----------------|
| δ_{ij} | Delta de Kronecker | |
| γ | Razão de calores específicos | [Adimensional] |
| Λ | Comprimento de onda | [m] |
| μ | Viscosidade dinâmica | [Pa.s] |
| μ_t | Viscosidade dinâmica turbulenta | [Pa.s] |
| ν | Razão de massa estequiométrica de oxigénio-combustível | |
| ν''_i | Coefficiente estequiométrico dos produtos | |
| ν'_i | Coefficiente estequiométrico dos reagentes | |

| | | |
|---------------|---|-----------------------------------|
| Ω | Máxima taxa de crescimento de onda | [1/s] |
| $\bar{\rho}$ | Massa específica média de Reynolds | [kg/m ³] |
| Φ | Razão de equivalência | |
| ρ | Massa específica do fluido | [kg/m ³] |
| ρ_g | Massa específica do gás | [kg/m ³] |
| ρ_l | Massa específica do líquido | [kg/m ³] |
| σ | Tensão superficial na interface líquido-gás | [N/m] |
| σ_{ij} | Tensor de tensão | |
| τ_{KH} | Tempo de quebra de KH | [s] |
| ν | Viscosidade cinemática | [m ² /s] |
| ν_t | Viscosidade cinemática turbulenta | [m ² /s] |
| ε | Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta | [m ² /s ³] |

Compostos e constantes

(A/F) Razão entre a massa de ar e a massa de combustível

| | | |
|------------------|---|------------------------|
| $[X_i]$ | Concentração molar da espécie i | [mol/m ³] |
| \bar{S}_p | Velocidade média do pistão | [m/s] |
| $\Delta h_{r,f}$ | Poder calorífico inferior do combustível | [J/kg] |
| \dot{m}'' | Fluxo de massa | [kg/s-m ²] |
| \dot{m} | Vazão de massa | [kg/s] |
| $\dot{m}_{r,f}$ | Vazão de queima de massa de combustível | [kg/s] |
| \dot{W}_μ | Perda de energia por efeitos viscosos | [J/s] |
| ℓ_k | Escala de comprimento de Kolmogorov | [m] |
| ℓ_o | Escala de comprimento integral | [m] |
| \mathcal{D} | Coefficiente de difusão de massa | [m ² /s] |
| \mathcal{D}_t | Coefficiente de difusividade molecular turbulenta | [m ² /s] |

| | | |
|---------------|---|----------------|
| \bar{u} | Velocidade média do escoamento | [m/s] |
| \tilde{u}_i | Velocidade média ponderada pela massa | [m/s] |
| B_d | Número de transferência de massa | [Adimensional] |
| B_T | Número de transferência de calor | [Adimensional] |
| C_μ | Constante de turbulência do modelo | |
| C_D | Coefficiente de arrasto | [Adimensional] |
| C_d | Coefficiente de descarga | [Adimensional] |
| D_v | Diâmetro da válvula | [m] |
| Da | Número de Damköhler turbulento | [Adimensional] |
| h_m | Entalpia da espécie m | [J/kg] |
| Ka | Primeiro número de Karlovitz turbulento | [Adimensional] |
| Ka_δ | Segundo número de Karlovitz turbulento | [Adimensional] |
| L_b | Comprimento de quebra | [m] |
| L_v | Elevação da válvula | [m] |
| Le | Número de Lewis | [Adimensional] |
| $m_{f,o}$ | Massa de combustível injetada por ciclo | [kg] |
| Nu | Número de Nusselt | [Adimensional] |
| Oh | Número de Ohnesorge | [Adimensional] |
| p_c | Pressão crítica | [Pa] |
| Pe | Número de Peclet | [Adimensional] |
| Pr | Número de Prandtl | [Adimensional] |
| Pr_t | Número de Prandtl turbulento | [Adimensional] |
| r_c | Taxa de compressão | [Adimensional] |
| R_s | Razão de swirl | [Adimensional] |
| R_{ij} | Tensor de Reynolds | |
| R_{tx} | Razão de tumble em x | [Adimensional] |

| | | |
|----------|---|-------------------|
| R_{ty} | Razão de tumble em y | [Adimensional] |
| Re | Número de Reynolds | [Adimensional] |
| S_L | Velocidade de chama laminar | [m/s] |
| S_p | Velocidade instantânea do pistão | [m/s] |
| S_t | Velocidade de chama turbulenta | [m/s] |
| Sc | Número de Schmidt | [Adimensional] |
| Sc_t | Número de Schmidt turbulento | [Adimensional] |
| Sh | Número de Sherwood | [Adimensional] |
| SMD | Diâmetro médio sauter | [m] |
| St | Número de Stokes | [Adimensional] |
| T | Número de Taylor | [Adimensional] |
| T_c | Temperatura crítica | [K] |
| u' | Flutuação da velocidade | [m/s] |
| u_i | Componente do vetor velocidade na direção i | |
| v | Velocidade média do escoamento | [m/s] |
| V_c | Volume morto | [m ³] |
| V_d | Volume deslocado | [m ³] |
| V_t | Volume total | [m ³] |
| We_g | Número de Weber do gás | [Adimensional] |
| We_l | Número de Weber do líquido | [Adimensional] |
| X_i | Fração molar de espécie i | [mol/mol] |
| Y_b | Fração de massa de combustível queimado | [kg/kg] |
| Y_m | Fração de massa da espécie m | [kg/kg] |

Abreviaturas

AMR Adaptive Mesh Refinement

ANP Agência Nacional do Petróleo, gás natural e biocombustíveis

ASTM American Society for Testing and Materials
DDB Modelo de deformação e quebra de gota
DDB Modelo de deformação e quebra de gota
DNS Direct Numerical Simulation
KH Modelo de quebra de Kelvin-Helmholtz
LABCET Laboratório de Combustão e Engenharia de Sistemas
Térmicos
LES Large Eddy Simulation
PMI Ponto morto inferior
PMS Ponto morto superior
RANS Equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds
RT Modelo de quebra de Rayleigh-Taylor
SVO Óleo vegetal puro
TAB Modelo de quebra Analogia de Taylor

SUMÁRIO

| | Página |
|---|---------------|
| 1 INTRODUÇÃO | 39 |
| 1.1 Motivações e contribuições | 40 |
| 1.2 Objetivos | 41 |
| 1.3 Organização do documento | 42 |
| 2 REVISÃO DOS FUNDAMENTOS | 45 |
| 2.1 Motores de ignição por compressão | 46 |
| 2.1.1 Parâmetros geométricos, de operação e de desempenho | 46 |
| 2.1.2 Ciclo termodinâmico | 49 |
| 2.1.3 Mistura combustível-ar | 51 |
| 2.1.4 Formação de mistura e combustão | 52 |
| 2.2 Combustíveis para motores de ignição por compressão | 54 |
| 2.2.1 Óleo diesel | 56 |
| 2.2.2 Biodiesel | 59 |
| 2.2.3 Óleo vegetal | 60 |
| 3 ANÁLISE DO ESCOAMENTO NA ADMISSÃO E COMPRESSÃO | 63 |
| 3.1 Introdução | 63 |
| 3.1.1 Parâmetros globais de admissão e escoamento no cilindro | 65 |
| 3.1.2 Objetivo do capítulo | 67 |
| 3.1.3 Organização do capítulo | 67 |
| 3.2 Revisão da literatura | 68 |
| 3.2.1 Modelagem de escoamento em motores | 68 |
| 3.2.2 Modelagem e solução numérica de escoamento turbulento | 71 |
| 3.2.2.1 Modelos de viscosidade turbulenta | 75 |
| 3.2.3 Trabalhos de simulação numérica do escoamento em MCI | 76 |
| 3.3 Modelagem e metodologia de solução | 78 |
| 3.3.1 Geometria do motor | 79 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 3.3.2 | Características do modelo numérico | 81 |
| 3.3.3 | Condições de contorno do modelo | 85 |
| 3.3.4 | Condições iniciais do modelo | 87 |
| 3.3.5 | Parâmetros de desempenho analisados | 88 |
| 3.4 | Resultados e análise | 88 |
| 3.4.1 | Coefficiente de descarga na admissão C_D | 88 |
| 3.4.2 | Eficiência volumétrica η_v | 90 |
| 3.4.3 | Estrutura do escoamento | 91 |
| 3.4.4 | <i>Swirl</i> e <i>Tumble</i> | 94 |
| 3.4.5 | Energia cinética turbulenta (k) e dissipação de energia cinética turbulenta (ε) | 98 |
| 3.4.6 | Pressão e temperatura | 99 |
| 3.5 | Conclusões | 101 |
| 4 | ANÁLISE DE SPRAY E DA ATOMIZAÇÃO . . | 103 |
| 4.1 | Introdução | 103 |
| 4.1.1 | Estrutura do spray em motores | 106 |
| 4.1.2 | Objetivos do capítulo | 109 |
| 4.1.3 | Organização do capítulo | 109 |
| 4.2 | Revisão da literatura de spray, atomização e de evaporação | 110 |
| 4.2.1 | Regimes de quebra de jatos líquidos | 110 |
| 4.2.2 | Características da turbulência | 113 |
| 4.2.3 | Dispersão turbulenta | 114 |
| 4.2.4 | Arrasto e deformação da gota | 116 |
| 4.2.5 | Modelagem de spray de combustível | 117 |
| 4.2.5.1 | Modelagem da quebra primaria | 118 |
| 4.2.5.2 | Modelagem da quebra secundaria | 121 |
| 4.2.5.3 | Interação entre gotas | 126 |
| 4.2.5.4 | Modelagem de evaporação de gota | 128 |
| 4.2.6 | Combustíveis usados | 136 |
| 4.2.6.1 | Propriedades do óleo diesel e do óleo vegetal de soja | 138 |
| 4.2.7 | Trabalhos de simulação numérica de spray | 143 |
| 4.3 | Modelagem e metodologia de solução | 147 |
| 4.3.1 | Injeção de combustível | 148 |
| 4.3.2 | Características do método numérico | 152 |
| 4.3.3 | Condições de contorno do modelo | 155 |
| 4.3.4 | Condições iniciais do modelo | 155 |
| 4.4 | Resultados e análise de spray | 155 |
| 4.4.1 | Penetração de spray líquido e de vapor de combustível | 156 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 4.4.2 | Massa de combustível evaporado | 163 |
| 4.4.3 | Velocidade do spray | 166 |
| 4.5 | Conclusões | 170 |
| 5 | ANÁLISE DA FORMAÇÃO DE MISTURA E COMBUSTÃO | 173 |
| 5.1 | Introdução | 173 |
| 5.1.1 | Parâmetros teóricos da combustão | 175 |
| 5.1.2 | Objetivo do capítulo | 182 |
| 5.1.3 | Organização do capítulo | 182 |
| 5.2 | Teoria de combustão turbulenta | 183 |
| 5.2.1 | Formação de mistura | 184 |
| 5.2.2 | Combustão turbulenta pré-misturada | 185 |
| 5.2.2.1 | Abordagem de curva de nível para regime de flamelets ondulados | 188 |
| 5.2.2.2 | Abordagem de curva de nível para regime de zonas de reação fina | 189 |
| 5.2.2.3 | Modelagem de combustão turbulenta pré-misturada baseada na Equação G | 190 |
| 5.2.3 | Combustão turbulenta não pré-misturada | 191 |
| 5.2.3.1 | Fração de mistura | 191 |
| 5.2.3.2 | Regime de combustão turbulenta não pré-misturada | 195 |
| 5.2.3.3 | Modelagem de combustão turbulenta não pré-misturada | 196 |
| 5.2.4 | Formação e oxidação de Fuligem | 198 |
| 5.2.5 | Formação de NOx | 200 |
| 5.2.6 | Modelo de cinética química detalhada | 201 |
| 5.2.7 | Trabalhos de simulação numérica de combustão | 202 |
| 5.3 | Modelagem de combustão e metodologia de solução | 204 |
| 5.3.1 | Injeção de combustível e combustão | 204 |
| 5.3.2 | Características do método numérico | 205 |
| 5.3.3 | Condições de contorno do modelo | 207 |
| 5.3.4 | Condições iniciais do modelo | 207 |
| 5.4 | Resultados e análise | 207 |
| 5.4.1 | Pressão no cilindro | 208 |
| 5.4.2 | Temperatura no cilindro | 209 |
| 5.4.3 | Taxa de liberação de calor | 211 |
| 5.4.4 | Atraso de ignição | 216 |
| 5.4.5 | Estrutura da chama | 220 |
| 5.4.6 | Formação de NOx e fuligem | 222 |
| 5.4.7 | Parâmetros de desempenho e de eficiência | 223 |

| | |
|-------------------------------|------------|
| 5.5 Conclusões | 225 |
| 6 CONCLUSÕES | 227 |
| REFERÊNCIAS | 229 |
| Apêndice A | 237 |

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

O motor a combustão interna de ignição por compressão é um motor de alta eficiência e como consequência, proporciona elevada economia de combustível. Neste tipo de motor, o combustível é injetado no cilindro no final do curso de compressão. Inicia-se então a formação da mistura combustível-ar. As características de formação desta mistura têm influência forte na combustão e formação de emissões poluentes. O próprio processo de injeção, junto com as condições termodinâmicas do ar recém-comprimido, gera a autoignição da mistura e, desta forma, o processo de combustão e a consequente liberação de calor são iniciados. A taxa de liberação de calor depende fortemente da evolução do spray (ou jato) de combustível, bem como da evaporação e processo de mistura do combustível com o ar. A liberação de calor produz uma variação do estado termodinâmico (em termos de pressão e temperatura) dos gases no cilindro a qual é aproveitada em forma de trabalho no eixo-virabrequim do motor.

O uso de óleo vegetal *in-natura* (*Straight Vegetable Oils* - SVOs) em motores de ignição por compressão fornece uma alternativa para máquinas agrícolas e operação de motores pequenos utilizados na geração termelétrica descentralizada, com apelos ambientais, económicos e de segurança energética.

No entanto, os motores disponíveis no mercado são projetados para a operação com óleo diesel, cujas propriedades termofísicas e químicas são bastante diferentes daquelas do óleo vegetal *in-natura*. Este fato resulta em diversas dificuldades operacionais.

A simples utilização de óleo vegetal *in natura* no interior de um combustor de óleo diesel ocasiona severos problemas de atomização e combustão, resultando em perda de potência e aumento da emissão de gases poluentes e particulados. Entre as estratégias utilizadas para melhora do desempenho dos motores estão a diluição do óleo vegetal *in natura* com aditivos e o aquecimento do óleo vegetal *in natura* antes da injeção, (Garzón, 2012). No entanto, estas estratégias visam basicamente aproximar a viscosidade dinâmica da mistura combustível com óleo vegetal *in natura* àquela do óleo di-

esel. Ainda desconhece-se o efeito das diferentes características de evaporação e de cinética química do óleo vegetal *in natura*, em relação com o óleo diesel, na fluidodinâmica do spray, formação de mistura e combustão no motor de ignição por compressão.

1.1 MOTIVAÇÕES E CONTRIBUIÇÕES

A diminuição das reservas de petróleo é uma preocupação global, já que afeta a segurança energética e diretamente contribui ao aumento do preço dos combustíveis fósseis.

Os óleos vegetais *in natura*, são óleos obtidos de fontes renováveis que têm propriedades combustíveis, permitindo a utilização em motores a combustão interna, porém, com diferentes resultados em relação ao óleo diesel.

A principal motivação desse trabalho é a possibilidade de contribuir para a utilização de biocombustíveis em motores a combustão interna de ignição por compressão através da avaliação da utilização de um desses combustíveis, os óleos vegetais *in-natura*, assim como através do desenvolvimento de metodologia de análise e projeto, baseada em simulação numérica, alimentada pela medição das propriedades dos combustíveis de interesse.

As propriedades termofísicas do óleo diesel e SVOs influenciam principalmente as características de injeção, combustão e emissões. As diferenças nas propriedades termofísicas entre o óleo diesel e SVOs é a maior justificativa para analisar o comportamento do SVO do ponto de vista das características do spray, como penetração, área de spray e atomização, e do ponto de vista da evaporação, formação de mistura, ignição, desenvolvimento da combustão, formação de emissões e material particulado. A análise destas características, partindo desde a injeção de combustível ate sua combustão, é importante já que o óleo vegetal *in natura* tem maiores valores de viscosidade, tensão superficial e massa específica, quando comparado com o óleo diesel. A oportunidade do uso de óleo vegetal *in natura* e sua mistura com óleo diesel em motores de combustão interna é uns dos motivos por os quais é importante analisar a influência no spray e combustão das principais propriedades deste tipo de combustível alternativo.

Na literatura têm sido reportadas análises experimentais e numéricas de atomização de spray, evaporação e combustão em motores a combustão interna de ignição por compressão usando como combustíveis biodiesel e óleo diesel. Nestes trabalhos tem sido usa-

dos diferentes softwares de simulação com mecanismos cinéticos como por exemplo do n-heptano e do n-dodecano. Entre os trabalhos feitos se podem nombrar os feitos pelos seguintes autores: (Som & Aggarwal, 2010), (Ramirez *et al.*, 2012a), (Lesnik *et al.*, 2013), (Senecal *et al.*, 2013), (Zhou *et al.*, 2015), (Gong *et al.*, 2014), (Lesnik *et al.*, 2013), (Ismail *et al.*, 2012), (Som *et al.*, 2011). Como principais conclusões dos autores se tem que o biodiesel pode ser usado como combustível alternativo em motores de trabalho pesado, e em termos do spray são obtidos resultados similares aos dados experimentais de SANDIA, em penetração de líquido e penetração de vapor para os combustíveis utilizados tanto nos testes experimentais como nas simulações. Nos resultados da combustão os autores obtêm bons resultados na predição do atraso de ignição, pressão no cilindro e taxa de liberação de calor.

A principal contribuição deste trabalho é a análise da combustão de spray usando simulação numérica, tanto para o óleo diesel como para a mistura combustível contendo óleo vegetal de soja *in natura*, considerando os efeitos das propriedades termofísicas de cada combustível na formação do spray, evaporação e mistura, ignição térmica e desenvolvimento da combustão. Uma segunda contribuição é a determinação das propriedades termofísicas de interesse para a simulação do spray de misturas de óleo de soja *in natura* e óleo diesel, tanto por medição direta de algumas propriedades, como pela utilização de informações disponíveis na literatura.

Para a simulação numérica foi utilizado o software *Converge CFD* e aplicam-se os modelos à simulação numérica de um motor de ignição por compressão monocilíndrico de quatro (4) tempos, comumente utilizado na geração de eletricidade em pequenas propriedades, para o qual estão disponíveis medições de pressão na câmara de combustão e outros parâmetros de desempenho.

1.2 OBJETIVOS

O objetivo principal deste trabalho foi analisar o efeito das propriedades termofísicas e químicas de uma mistura de óleo vegetal *in natura* e óleo diesel na formação de spray, mistura e combustão em um motor a combustão interna de ignição por compressão. Esta análise é realizada por comparações entre resultados de simulação numérica do motor operando com o combustível alternativo e com o óleo diesel convencional. Os combustíveis utilizados nas análises foram óleo diesel (100%) e uma mistura de 80% em volume de óleo

vegetal de soja *in natura* e 20% de óleo diesel (mistura 80s20d).

Os objetivos específicos são:

1. Modelar as propriedades termofísicas e termoquímicas dos combustíveis utilizados.
2. Fazer a análise da estrutura do escoamento gerado pela admissão e compressão, descrevendo os escoamentos principais na câmara de combustão.
3. Simular a atomização e formação de mistura na câmara de combustão.
4. Simular a ignição e combustão de mistura.
5. Comparar os valores médios de pressão na câmara de combustão e parâmetros de desempenho indicados no motor com medições em bancada de dinamômetro.
6. Elaborar as respectivas recomendações sobre a utilização de óleo vegetal *in natura* como combustível em motores a combustão interna de ignição por compressão.

1.3 ORGANIZAÇÃO DO DOCUMENTO

O documento está estruturado em cinco (5) capítulos. O capítulo 2 apresenta uma revisão dos fundamentos de motores de combustão interna de ignição por compressão e dos combustíveis usados nas simulações numéricas. Os capítulos 3, 4 e 5 abordam separadamente os aspectos de admissão, compressão, injeção, atomização, formação de mistura, combustão e expansão.

No capítulo 3 é descrita a modelagem de escoamento turbulento em motores de combustão interna, mostrando as equações governantes e as metodologias de solução numérica, concentrando a análise nas equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds (RANS). Depois é apresentada uma relação de trabalhos numéricos e experimentais de escoamento turbulento em motores de combustão interna. É descrita a modelagem e a metodologia de simulação, relacionando os parâmetros geométricos do motor e descrevendo a geometria usada. Finalmente são apresentados resultados das simulações e uma análise crítica dos mesmos, levando em conta os parâmetros como eficiência volumétrica, coeficientes de descarga, campos de pressão, temperatura, velocidade, energia cinética turbulenta, *Swirl* e *Tumble*.

O capítulo 4, correspondente à fenomenologia e análise do spray de combustível sem combustão, apresenta uma revisão da modelagem de spray e evaporação em motores de combustão interna, descrevendo principalmente os modelos que foram usados na simulação. É apresentada uma descrição da abordagem nas pesquisas feitas em diferentes tópicos que envolvem o spray de diesel e óleo vegetal, os quais são usados como referência. É feita uma descrição teórica da atomização de spray com ênfase nos modelos de quebra primária, quebra secundária e iteração turbulenta. Depois é descrita a metodologia de solução no software *Converge CFD*, relacionando a geometria usada e as características do método numérico. Ao final do capítulo são descritos os resultados obtidos nas simulações numéricas, onde são analisados parâmetros tais como penetração de spray, diâmetro da gota, massa de combustível evaporada, razão de equivalência, forma e velocidade do spray.

Tabela 1 – Casos simulados e suas características. (Fonte: Autor)

| Características | Admissão e compressão | Spray e atomização | Combustão de spray |
|-----------------------------|-----------------------|--|--|
| Ângulo de simulação [graus] | -360 até -20 | -20 até 120 | -20 até 360 |
| Ângulo de injeção [graus] | na | -15 até 15 | -15 até 15 |
| Malha base [mm] | 4 | 1,2 | 5 |
| Combustíveis | na | Diesel e mistura 80s20d | Diesel e mistura 80s20d |
| Sub modelos | na | Quebra de gota Tamanho de gota Temperatura de gota Dispersão Colisão Iteração com parede Arrasto de gota | Modelos usados no spray e atomização Mecanismo cinético Emissões de NOx Fuligem |

A combustão do spray de combustível é abordada no capítulo 5, onde inicialmente é feita uma revisão dos parâmetros importantes na combustão de spray em motores de ignição por compressão, fazendo uma descrição de cada um deles e sua modelagem. Posteriormente são descritos os diferentes regimes de combustão, definindo conceitos importantes como penetração de spray e de vapor, estequi-

ometria, ignição, razão de equivalência, fração de mistura, combustão turbulenta pré - misturada e não pré - misturada. É feita então uma descrição da metodologia de solução implementada no software *Converge CFD*, descrevendo a geometria usada na simulação assim como as características do método numérico para finalmente analisar os resultados obtidos nas simulações, comparando-os dados experimentais obtidos na bancada do LABCET.

A Tabela 1 apresenta um resumo das condições e delimitações dos tópicos abordados nos capítulos 3, 4 e 5. Essa análise progressiva permitiu o enfoque em cada modelagem necessária e facilitou o desenvolvimento das simulações numéricas. O trabalho é concluído com o capítulo 6 resumindo conclusões gerais e recomendações para trabalhos futuros.

Capítulo 2

REVISÃO DOS FUNDAMENTOS

O motor a combustão interna é uma máquina térmica que converte a energia química de um combustível em energia mecânica. Inicialmente, a energia química é liberada em forma de energia interna sensível em um processo de combustão e posteriormente os gases, em alta temperatura e pressão, expandem gerando a movimentação de componentes mecânicos dentro do motor (pistão, biela no caso dos motores alternativos, ou turbina no caso dos motores rotativos).

O motor de combustão interna teve os seus inícios no final do século XIX. No ano 1860, J.E.E Lenoir realizou a primeira tentativa de um motor de combustão interna operando sem compressão da mistura reagente. Em 1862, Alphonse de Beau de Rochas obteve a patente francesa de um motor de quatro tempos. Em 1867 Nicolaus Otto e Eugen Langen, na Alemanha, desenvolveram o motor com compressão da mistura. Em 1876, Nicolaus Otto gerou um motor de quatro tempos, cujas características básicas são as mesmas dos motores de hoje. Em 1880, Dugald Clerk e James Jobson (ingleses) e Karl Benz (alemão) desenvolveram o motor de dois tempos. Em 1892, Rudolf Diesel desenvolve o motor de ignição por compressão, e 5 anos após desenvolveria o primeiro protótipo comercial bem sucedido. Em 1957, Felix Wankel conseguiu o primeiro teste bem sucedido do motor rotativo. Os motores a combustão interna, alternativos, usados na atualidade são derivados dos construídos por Otto e Diesel, também chamados motores de ciclo Otto e motores de ciclo Diesel. Os motores de ciclo Otto utilizam combustível volátil, como gasolina e/ou álcool, e utilizam uma fonte de ignição externa. Os motores de ciclo Diesel utilizam como combustível o óleo diesel, para o qual a ignição do combustível injetado, sob condições termodinâmicas favoráveis, gera a auto-ignição da mistura.

Na operação de um motor de combustão interna alternativo, o pistão “alterna” a sua posição entre dois pontos definidos pelo projeto do motor, que são o ponto morto superior (PMS), e o ponto morto inferior (PMI). A movimentação linear do pistão gera a rotação do virabrequim através de um mecanismo biela-manivela. No

Tabela 2 – Descrição dos processos no motor de combustão interna de 4 tempos de ignição por compressão

| Tempo | Movimento do pistão | Processo no cilindro |
|-------------------------------|-----------------------|--|
| I Admissão | PMS \Rightarrow PMI | Aspiração do ar do ambiente para o cilindro. |
| II Compressão | PMI \Rightarrow PMS | Compressão da mistura. A temperatura e pressão aumentam e um pouco antes do PMS é realizada a injeção do combustível seguida por autoignição térmica. |
| III Expansão (Potência) | PMS \Rightarrow PMI | A energia química do combustível, por meio da oxidação, transforma-se em energia mecânica através do mecanismo biela-manivela. |
| IV Exaustão | PMI \Rightarrow PMS | Esvaziamento do cilindro como exaustão dos gases queimados. Quando o pistão aproxima-se do PMS, é aberta a válvula de admissão e fechada a válvula de exaustão para assim iniciar um novo ciclo de operação. |

PMS, o pistão está na posição que gera o menor volume no cilindro (V_c) e no PMI a posição do pistão gera o maior volume do cilindro (V_t). A diferença destes dois volumes é conhecida como volume deslocado (V_d). A Fig. 1 mostra as principais características geométricas do motor e na Tabela 2 são descritos os processos que acontecem no ciclo de 4 tempos, em termos de deslocamento do pistão em motores de ignição por compressão.

2.1 MOTORES DE IGNIÇÃO POR COMPRESSÃO

A operação dos motores de ignição por compressão baseia-se na auto-ignição da mistura combustível gerada pelas condições termodinâmicas no cilindro após a injeção do combustível (injeção direta) ou na pré-câmara de combustão (injeção indireta) quando o ar, recém comprimido no curso de compressão, encontra-se em temperatura e pressão alta.

2.1.1 Parâmetros geométricos, de operação e de desempenho

A geometria básica de um motor a combustão interna alternativo é definido por diferentes parâmetros. O parâmetro geométrico denominado taxa de compressão (r_c) é a razão entre o volume total

do cilindro (V_t) e o volume da câmara de combustão (V_c),

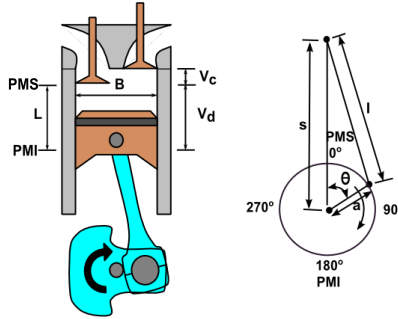


Figura 1 – Esquema mostrando a geometria básica e dimensões principais do conjunto cilindro, pistão e manivela. (Fonte Autor)

$$r_c = \frac{V_d + V_c}{V_c}. \quad (2.1)$$

A distância entre a linha do centro do virabrequim e linha do centro do pino do pistão (s) (ver Fig. 1) pode ser obtida a partir de (Heywood, 1988):

$$s = a \cos \theta + (l^2 - a^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.2)$$

onde a é comprimento da manivela, l é comprimento da biela e θ é o ângulo da manivela. A partir desse comprimento, obtém-se a velocidade instantânea do pistão, $S_p = ds/dt$, por

$$S_p = \bar{S}_p \frac{\pi}{2} \sin \theta \left[1 + \frac{\cos \theta}{(R_1^2 - \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}}} \right], \quad (2.3)$$

onde R_1 é razão entre o comprimento da biela e comprimento da manivela. A velocidade média do pistão (\bar{S}_p) é obtida de

$$\bar{S}_p = 2LN, \quad (2.4)$$

onde L é o curso do pistão e N é a velocidade de rotação do virabrequim em rev/s.

O torque medido no dinamômetro de freio (T), é uma medida da capacidade do motor de produzir trabalho e pode ser obtido de

$$T = Fb, \quad (2.5)$$

onde F é a carga no motor e b é o braço da alavanca do dinamômetro. Com os dados obtidos do dinamômetro pode se calcular o trabalho de freio por revolução do motor, a potência de freio e a pressão média efetiva de freio, as quais são dadas respetivamente por,

$$W_b = 2\pi T, \quad (2.6)$$

$$P_b = 2\pi NT, \quad (2.7)$$

$$p_{bme} = \frac{P_b n_R}{NV_d}, \quad (2.8)$$

onde n_R é o número de revoluções da manivela para cada ciclo ($n_R = 2$ para o ciclo de 4 tempos).

Os parâmetros de desempenho indicados são aqueles obtidos a partir do diagrama p - V . Num motor a combustão interna o trabalho líquido feito pelo gás sobre o pistão é:

$$W_{c,i} = \oint p dV. \quad (2.9)$$

O trabalho feito sobre o gás durante a admissão e a exaustão, chamado trabalho de bombeamento por ciclo (W_p), é calculado entre o ponto morto depois da exaustão e o ponto morto ao final da admissão. O trabalho executado pelo gás durante a compressão e a expansão, ou trabalho total indicado por ciclo ($W_{c,ig}$) é calculado entre o ponto morto inferior antes da compressão e o ponto morto inferior após a expansão ($W_{c,i} = W_{c,ig} - W_p$). A potência por cilindro indicada (P_i) é então obtida de

$$P_i = \frac{W_{c,i} N}{n_R}. \quad (2.10)$$

O consumo específico de combustível (sfc) é uma medida da eficiência de como o motor aproveita o combustível para produzir trabalho, sendo calculado por

$$sfc = \frac{\dot{m}_f}{P}, \quad (2.11)$$

onde \dot{m}_f é a vazão média de combustível e P é a potência de freio ou a potência indicada quando o consumo específico é o consumo específico indicado.

A eficiência mecânica (η_m) é a razão entre a potência de freio e a potência indicada

$$\eta_m = \frac{P_b}{P_i}. \quad (2.12)$$

A eficiência volumétrica (η_v) mede a capacidade do motor de prover o máximo enchimento com ar para a combustão

$$\eta_v = \frac{2\dot{m}_a}{\rho_{a,i}V_dN} = \frac{m_a}{\rho_{a,i}V_d}. \quad (2.13)$$

onde, \dot{m}_a é a vazão média de ar por ciclo, $\rho_{a,i}$ é a massa específica média do ar, m_a é a massa de ar admitida por ciclo.

A eficiência de conversão de combustível (η_f) mede a capacidade do motor de converter a energia do combustível em trabalho e pode ser determinada da seguinte forma

$$\eta_f = \frac{W_c}{m_f Q_{r,f}} = \frac{P}{\dot{m}_f Q_{r,f}} = \frac{1}{sfc Q_{r,f}}, \quad (2.14)$$

onde, W_c é o trabalho líquido por ciclo, $Q_{r,f}$ é o poder calorífico inferior da mistura de combustível-ar.

2.1.2 Ciclo termodinâmico

A operação do motor de ignição por compressão ideal é descrita termodinamicamente através de hipóteses de processos ideais. Este ciclo é conhecido como ciclo diesel ideal. No ciclo diesel ideal são consideradas as seguintes hipóteses: (a) o fluido de trabalho é um gás ideal com calor específico constante, (b) a massa do fluido é constante durante o ciclo, (c) a combustão é modelada como adição de calor a pressão constante, provindo de uma fonte externa, (d) a exaustão é modelada como rejeição de calor a volume constante para uma fonte fria. A Fig. 2 mostra no diagrama $p-v$ os processos que formam o ciclo termodinâmico ideal para um motor de ignição por compressão, descritos assim:

1. Do ponto 1 ao ponto 2: Compressão isentrópica. O volume dos gases é reduzido de forma adiabática e reversível, aumentando a sua massa específica, temperatura e pressão, e absorvendo trabalho.
2. Do ponto 2 ao ponto 3: Adição de calor a pressão constante. Neste processo, calor é adicionado ao sistema termodinâmico

mantendo a pressão constante, emulando desta forma o processo de combustão.

3. Do ponto 3 ao ponto 4: Expansão isentrópica. Os gases expandem de forma adiabática reversível na direção do ponto morto inferior, empurrando o pistão e gerando trabalho útil.
4. Do ponto 4 ao ponto 5: Rejeição de calor a volume constante. Neste processo, emulando a abertura da válvula de exaustão, é assumida uma rejeição de calor a volume constante, gerando uma queda na pressão do sistema.
5. O ponto 5 e o ponto 1 têm a mesma localização no diagrama $p - v$ do ciclo ideal, isto indica que no ciclo ideal, não existe uma troca ou renovação de gases. Aquela mesma massa de gás que foi comprimida e recebeu a adição de calor, que depois expandiu e sofreu a rejeição de calor começa de novo o ciclo de compressão, para posteriormente receber de novo a adição de calor num novo ciclo de trabalho do motor. Esta é uma das hipóteses mais “delicadas” de se assumir ciclo ideal, pois nos motores reais têm, e deve existir, a renovação dos gases de admissão. A linha entre os pontos 5 e 6 representaria a exaustão de gases, e a linha entre os pontos 6 e 1 representaria a nova admissão de ar, dois processos que, como explicado anteriormente não acontecem no ciclo ideal, mais são comumente ilustrados nos diagramas $p - v$ do ciclo ideal.

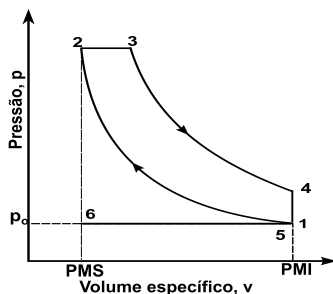


Figura 2 – Diagrama $p - v$ do ciclo ideal diesel. (Fonte: Autor)

Assumindo ciclo ideal, a eficiência do ciclo diesel ou ciclo a

pressão constante é:

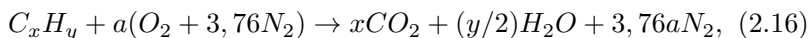
$$\eta = 1 - \frac{1}{\gamma} \left(\frac{1}{r_1} \right)^{\gamma-1} \frac{\beta^\gamma - 1}{\beta - 1}, \quad (2.15)$$

onde, γ é a razão entre o calor específico a pressão constante e o calor específico a volume constante, $\beta = r_1/r_2$, sendo $r_1 = V_1/V_2$ a razão de compressão e $r_2 = V_4/V_3$ é a razão de expansão.

A consideração de ciclo ideal é a modelagem termodinâmica mais simples do ciclo diesel, a qual fornece as principais tendências de operação do ciclo real.

2.1.3 Mistura combustível-ar

No motor diesel o combustível injetado forma uma mistura reagente com o ar que foi admitido no cilindro. A estequiometria permite quantificar a massa de espécies químicas que participam na combustão, as quais são comumente as espécies químicas do oxidante (ar) e as espécies químicas que formam o combustível (combustível de origem fóssil ou biocombustíveis). A quantidade mínima de oxidante que é necessária para queimar completamente o combustível é chamada de quantidade estequiométrica de oxidante. Uma reação estequiométrica é a reação química de combustão que gera somente produtos saturados de combustão, na qual é expressa a conservação de elementos e conservação de massa, por exemplo, para um combustível hidrocarboneto de forma genérica C_xH_y a relação estequiométrica é dada pela seguinte relação (Turns, 2000)



onde o parâmetro a é calculado pelo balanceamento dos elementos da reação. Na reação o ar é considerado que é ar seco padrão, cuja composição molar simplificada apresenta frações molares $X_{O_2}=0,21$ e $X_{N_2}=0,79$.

A razão estequiométrica entre a massa de ar e a massa de combustível pode ser calculada como

$$(A/F)_{estq} = \left(\frac{m_a}{m_f} \right)_{estq}. \quad (2.17)$$

O desvio da estequiometria é caracterizado pela razão de equivalência (Φ), a qual é usada para quantificar se uma mistura de

oxidante - combustível é estequiométrica ($\Phi = 1$), é pobre ($\Phi < 1$) ou é rica ($\Phi > 1$), e é expressa como

$$\Phi = \frac{(A/F)_{esteq}}{(A/F)}, \quad (2.18)$$

onde (A/F) é a razão entre a massa de ar e a massa de combustível da reação. Em uma reação pobre existe presença de oxigênio nos produtos e em uma reação rica existe presença de combustível nos produtos.

2.1.4 Formação de mistura e combustão

Os processos envolvidos na formação de mistura e combustão em motores diesel são a injeção, a formação do spray, a formação de mistura, o atraso de ignição, a combustão e a formação de fuligem e NOx. Os sub processos envolvidos são mostrados na Fig. 3, e eles acontecem em grande parte simultaneamente, e interagem uns com os outros.

O spray gerado na injeção pode ser subdividido em duas regiões, uma com um spray denso próximo da saída do bocal, e uma região de spray diluído na parte de frente do escoamento. A primeira decomposição do combustível em porções com formato quase cilíndrico e gotículas é chamado quebra primária, e a quebra de gotas já existentes em gotas menores devido às forças aerodinâmicas causadas pela velocidade relativa entre a gota e o ambiente é chamada de quebra secundária. Além disso, as gotas podem colidir e coalescer.

O combustível atomizado em pequenas gotículas inicia o processo de vaporização e posterior mistura com o ar em torno ao jato formado pelo spray, resultando em uma mistura heterogênea combustível-ar. Sob condições termodinâmicas apropriadas, a combustão inicia-se como consequência da alta temperatura e pressão (auto-ignição). A combustão em motores diesel modernos começa quase no início da injeção do combustível com um pequeno atraso da ignição, devido à alta taxa de compressão e regulação da pressão de injeção.

O atraso de ignição é o intervalo de tempo entre o início da injeção e o início da combustão, e é influenciado por fatores físicos e químicos, cada qual aportando uma parcela de tempo de atraso ao atraso de ignição total. O atraso físico é caracterizado pela própria inércia dos componentes mecânicos do sistema de injeção assim como das propriedades físicas do combustível (atomização, vaporização do combustível e o nível de mistura combustível-ar no

cilindro). O atraso químico é consequência da cinética química, de ignição após estarem misturados os reagentes e em condições termodinâmicas aptas para se desenvolver a auto-ignição (cinética pré-combustão). O atraso da ignição pode ser controlado por meio da temperatura e da pressão no início da injeção, a razão de compressão, a injeção inicial e as temperaturas de parede, além disso, a capacidade de ignição do combustível (índice de cetano) e outros parâmetros, tais como pressão de injeção, geometria dos orifícios do injetor e o escoamento no cilindro (Merker *et al.*, 2009).

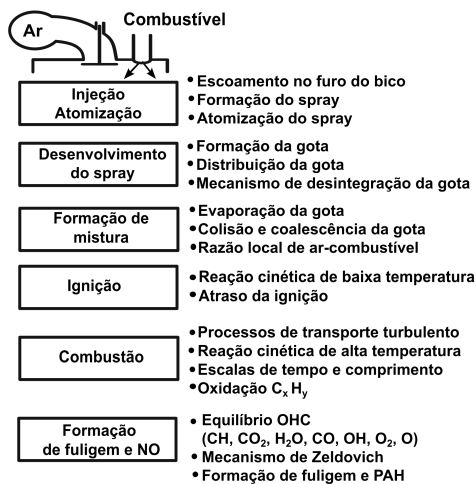


Figura 3 – Processos de formação de mistura e combustão em motores diesel. (Adaptado de (Merker *et al.*, 2009))

A sequência de combustão no motor diesel pode ser subdividida em três fases: (a) Combustão pré-misturada, aonde o combustível injetado durante o atraso da ignição se mistura com o ar na câmara de combustão e queima, (b) combustão principal, aonde a liberação de calor é controlada pelos processos de mistura turbulenta entre o combustível-ar e é chamada de combustão controlada por mistura, (c) pós-combustão, aonde as últimas parcelas de combustível ainda sem queimar, evoluem cineticamente até completar a queima do combustível no cilindro.

Os produtos da combustão de motores diesel incluem fuligem, hidrocarbonetos não queimados, óxidos nítricos e monóxido de carbono. Em motores diesel, o NO_x e material particulado são as emis-

sões mais importantes, e estão sendo feitos esforços contínuos para minimizar as quantidades desses dois poluentes, (Heywood, 1988).

2.2 COMBUSTÍVEIS PARA MOTORES DE IGNIÇÃO POR COMPRESSÃO

Os combustíveis de motores diesel são misturas de várias centenas de diferentes hidrocarbonetos de vários grupos. Estes componentes diferem com referência ao tamanho e forma da estrutura molecular e como resultado têm propriedades diferentes. Há quatro classes principais de hidrocarbonetos: parafinas, naftenos, olefinas e aromáticos. Cada classe é uma família de moléculas de hidrocarbonetos que apresentam uma característica estrutural comum, mas diferem em tamanho (número de átomos de carbono), proporção de átomos de carbono e hidrogênio, forma da ligação química entre carbonos e a estrutura molecular.

As parafinas ou alcanos são hidrocarbonetos acíclicos e saturados, isto é, que têm cadeias abertas e apresentam apenas ligações simples entre seus átomos de carbono, têm a fórmula geral C_nH_{2n+2} , onde n é o número de átomos de carbono. Existem duas subclasses de parafinas: parafinas de cadeia reta (n -parafinas) que possuem átomos de carbono ligados para formar moléculas de cadeia semelhante, com cada carbono - exceto aqueles nas extremidades - ligado a outros dois, um em cada lado, e as isoparafinas que têm uma espinha dorsal de carbono semelhante, mas elas também têm um ou mais átomos de carbono em ramificação a partir da espinha dorsal. Na Fig. 4 pode se ver a fórmula e a representação gráfica de parafinas.

As olefinas ou alcenos são semelhantes às parafinas, mas têm menos átomos de hidrogênio e contém pelo menos uma ligação dupla entre átomos de carbono. Olefinas raramente estão presentes em petróleo bruto; elas são formadas por determinados processos de refinaria. Olefinas com uma dupla ligação $c - c$ têm a fórmula geral C_nH_{2n} , o mesmo que os naftenos. Na Fig. 4 pode se ver a fórmula e a representação gráfica de olefinas.

Hidrocarbonetos acetilênicos ou alcinos são acíclicos contendo uma única ligação tripla $c - c$ em sua cadeia carbônica e têm fórmula geral C_nH_{2n-2} . Nos alcinos mais complexos, a cadeia principal é a mais longa que contém a ligação tripla. Na Fig. 4 pode se ver a fórmula e a representação gráfica de acetilênicos.

Naftenos (ou cicloalcanos e cicloparafinas) têm alguns dos seus átomos de carbono dispostos em um anel. Os naftenos em com-

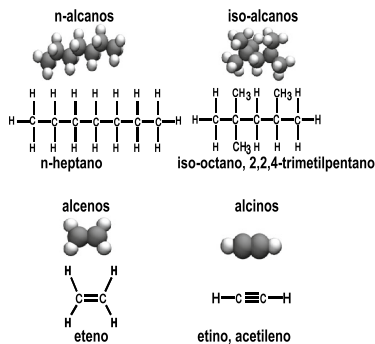


Figura 4 – Fórmulas estruturais e representação gráfica de parafinas, olefinas e acetilênicos. (Adaptado de (Merker *et al.*, 2009))

bustível diesel têm anéis de cinco ou seis carbonos. Às vezes, dois ou mais anéis são fundidos em conjunto com alguns átomos de carbono partilhados pelos anéis adjacentes. Naftenos com um anel têm a fórmula geral C_nH_{2n} . Na Fig. 5 pode se ver a fórmula e a representação gráfica de naftenos.

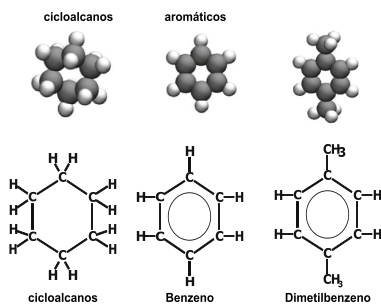


Figura 5 – Fórmulas estruturais e representação gráfica de naftenos e aromáticos. (Adaptado de (Merker *et al.*, 2009))

Nos compostos aromáticos, da mesma forma que acontece com os naftenos, alguns dos átomos de carbono estão dispostos em um anel, mas eles são unidos por ligações aromáticas, e são as únicas ligações encontradas em naftenos. Anéis de hidrocarbonetos aromáticos contêm seis átomos de carbono. O benzeno é o composto aromático mais simples e a estrutura do benzeno foi originalmente

conceituada como duas estruturas equivalentes com a alternância de ligações simples e duplas. A representação abreviada de benzeno é um hexágono com um círculo dentro representando as ligações aromáticas. Os compostos aromáticos de anel têm a fórmula geral C_nH_{2n-6} . Na Fig. 5 pode se ver a fórmula e a representação gráfica de aromáticos.

As parafinas e naftenos são classificados como hidrocarbonetos saturados porque não é possível adicionar mais átomos de hidrogênio sem quebrar a espinha dorsal de carbono. Aromáticos e olefinas são classificados como hidrocarbonetos insaturados. Eles contêm ligações duplas ou triplas $c-c$ ou ligações aromáticas que podem ser convertidas em ligações simples por adição de átomos de hidrogênio com átomos de carbono adjacentes. Quando olefinas de cadeia linear são saturadas com hidrogênio, tornam-se parafinas. Quando aromáticos são completamente saturados com hidrogênio, eles se tornam naftenos; quando são parcialmente saturados, tornam-se olefinas cíclicas.

2.2.1 Óleo diesel

O óleo diesel é um combustível derivado do petróleo, constituído basicamente por hidrocarbonetos, que contém de 8 a 38 átomos de carbono em sua cadeia (C_8 a C_{38}), sendo que aproximadamente 40% são de n-alcenos, 39% cicloalcenos, 20% de hidrocarbonetos aromáticos e o restante é formado por isoprenóides como enxofre, oxigênio e nitrogênio. Contudo, a composição de um óleo diesel específico dependerá da fonte do petróleo, do método de produção e dos processos de destilação.

O combustível diesel é obtido com uma grande variedade de pesos moleculares e propriedades físicas. De um modo geral, quanto maior for a refinação feita em uma amostra de combustível, menor é o seu peso molecular e menor é a sua viscosidade. Nos Estados Unidos, a ASTM International classifica o óleo diesel em três graus: No. 1-D o qual é um combustível ligeiro medianamente destilado, No. 2-D que é um combustível medianamente destilado (definido de aqui para frente como D2) e No.4-D, combustível pesado destilado. Os graus mais baixos têm os menores pesos moleculares e menor viscosidade. Para simplificar os cálculos da combustão, estes combustíveis são frequentemente aproximados a moléculas simples.

A especificação ASTM International (ASTM D 975 - Especificação padrão para Óleos Diesel) especifica as propriedades neces-

sárias de óleo diesel e estabelece os limites para os valores dessas propriedades. Estes requisitos são listados na Tabela 3 para os sete tipos de combustível diesel definidos pela especificação. A especificação D 975 também contém os métodos de teste padrão usados para medir os valores das propriedades. Além disso, esta especificação reconhece alguns requisitos estabelecidos para reduzir as emissões. Especificações do combustível diesel na União Europeia são semelhantes, mas não idênticas às especificações nos EUA.

A Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), mediante a Resolução ANP No. 30, de 26.06.2016 - DOU 24.06.2016, regulamenta as especificações do óleo diesel.

Para os compostos do óleo diesel da mesma classe, o ponto de ebulição aumenta com o número de carbonos. Para os compostos com o mesmo número de carbono, o ponto de ebulição aumenta de forma progressiva da seguinte forma por classe de hidrocarboneto: isoparafinas, n-parafinas, naftenos, e aromáticos. Assim, os compostos que mudam de fase perto de 260 °C, valor médio do intervalo de ebulição do combustível diesel, podem ser aromáticos C₁₂, naftenos C₁₃, n-parafinas C₁₄ e as isoparafinas C₁₅.

O ponto de congelamento (ponto de fusão) também aumenta com a massa molar, mas é fortemente influenciado pela estrutura molecular. As moléculas que se encaixam mais facilmente em uma estrutura cristalina têm pontos de congelamento mais elevadas do que outras moléculas. Isto explica os pontos de fusão elevados de n-parafinas e aromáticos em comparação com os pontos de fusão de isoparafinas e naftenos do mesmo número de carbonos.

Para os compostos da mesma classe, a massa específica aumenta com o número de carbonos. Relativamente os compostos com o mesmo número de carbonos, a ordem de aumento da massa específica é parafinas, naftenos, e aromáticos.

Em relação aos compostos com o mesmo número de carbonos, a ordem de aumento do poder calorífico por classe é aromáticos, naftenos, e parafinas em base mássica. No entanto, a ordem é invertida para uma comparação em termos de volume, com maior valor para os aromáticos e parafinas tendo o menor poder calorífico.

O número de cetano indica a maior ou menor inflamabilidade do combustível e varia sistematicamente com a estrutura dos hidrocarbonetos. Parafinas de cadeia reta (ou normais) têm números elevados de índice de cetano, que aumentam com a massa molar. Isoparafinas têm uma ampla gama de índices de cetano, a partir de cerca de 10 a 80. As moléculas com várias cadeias laterais curtas

Tabela 3 – Requisitos para Óleos Diesel ASTM D 975 (Adaptado de (Corporation, 2007))

| Propriedade | Método de Teste | S15, S500, S5000* (No. 1-D) | S15, S500, S5000* (No. 2-D) | (No. 4-D) |
|--|--------------------|-----------------------------|-----------------------------|-------------|
| Ponto de inflamação, °C (°F), min | D 93 | 38 (100) | 52 (125) | 55 (130) |
| Água e sedimentos, % volume, máx | D 2709 | 0,05 | 0,05 | - |
| | D 1976 | | | 0,50 |
| Temperatura de destilação, °C (°F), 90% volume recuperado: min máx | D 86 | . | . | |
| | | 288 (550) | 282 (540) 338 (640) | |
| Destilação simulada, °C (°F), 90% volume recuperado: min máx | D 2887 | . | . | |
| | | 304 (572) | 300 (572) 356 (673) | |
| Viscosidade cinemática, mm ² /s a 40 °C (104 °F): min máx | D 445 | . | . | . |
| | | 1,3 2,4 | 1,9 4,1 | 5,5 24,0 |
| Cinza, % de massa, máx | D 482 | 0,01 | 0,01 | 0,01 |
| Enxofre, ppm (µg/g), máx % de massa, min % de massa, máx | D 5453 | 15 | 15 | . |
| | D 2622 | 0,05 | 0,05 | . |
| | D 129 | 0,50 | 0,50 | 2,00 |
| Classificação de Corrosão de lamina de cobre, máx depois de 3h a 50 °C (122 °F) | D 130 | No. 3 | No. 3 | . |
| Número cetano, min Um dos seguintes itens devem ser atendidos: (1) Índice de cetano, min (2) Aromaticidade, % volume, máx | D 613 | 40 | 40 | 30 |
| | | . | . | . |
| | D 796-80 D 1319 | 40 35 | 40 35 | . |
| Ponto de nuvem, °C (°F), máx Ou LTFC/CFPP °C (°F), máx | D 2500 | . | . | |
| | D 4539/D 6371 | varia | varia | |
| Resíduo de Carbono Ramsbottom, máx (% Em massa, 10% Resíduos de Destilação) | D 525 | 0,15 | 0,35 | |
| Lubricidade, 60 °C, WSD, microns, máx | D 6079 | 520 | 520 | |

têm baixos números de cetano; enquanto as moléculas com uma cadeia lateral de quatro ou mais carbonos têm elevados números de cetano. Naftenos geralmente têm número de cetano entre 40 e 70. Moléculas de peso molecular maior e com uma longa cadeia lateral têm números de cetano elevados; moléculas de baixo peso molecular com cadeias laterais curtas têm baixo número de cetano. Aromáticos têm número de cetano que variam de zero a 60. As moléculas

com dois ou três anéis aromáticos fundidos têm número de cetano abaixo de 20.

A viscosidade é essencialmente associada à massa molar do hidrocarboneto, porém, também depende do tipo de cadeia, se é ramificada (isoparafinas) a tendência é de ser maior em relação aos hidrocarbonetos de cadeia normal (n-parafinas). Para um determinado número de carbonos, naftenos geralmente têm viscosidades ligeiramente superiores às parafinas ou aromáticos.

Os compostos sulfurados estão presentes em todos os tipos de óleo cru, e quanto maior a massa específica do petróleo maior é o teor de enxofre. O enxofre é um elemento indesejável em qualquer combustível devido à ação corrosiva de seus compostos e à formação de SO_2 (dióxido de enxofre) e SO_3 (trióxido de enxofre), o qual em reação com a água dos produtos de combustão leva à formação de ácido sulfúrico (H_2SO_4), que é altamente corrosivo para as partes metálicas dos equipamentos, além de ser poluente (chuva ácida).

2.2.2 Biodiesel

O nome de biodiesel tem sido dado ao óleo vegetal transesterificado para descrever a sua utilização como combustível para motores diesel. Os óleos vegetais podem ser convertidos em ésteres (m)etílicos através de um processo de transesterificação na presença de um catalisador. A finalidade da transesterificação é produzir um combustível a partir de óleo vegetal que possa ser usado em motor diesel com pouca ou nenhuma modificação no projeto do motor. O biodiesel produz menor potência e torque, gerando desta forma um maior consumo de combustível no motor, quando comparado ao óleo diesel No. 2 (D2). Biodiesel é melhor do que o óleo diesel em termos de teor de enxofre, ponto de fulgor, teor de hidrocarbonetos aromáticos e biodegradabilidade. A maior parte do biodiesel produzido atualmente utiliza o óleo de soja, metanol e um catalisador alcalino (principalmente KOH). O elevado valor do óleo de soja como um produto alimentício, faz a produção de um combustível de baixo custo muito desafiante. No entanto, existem grandes quantidades de óleos e gorduras de baixo custo, tais como gorduras animais e resíduos de restaurante que podem ser convertidos em biodiesel, (Demirbas, 2008).

Em termos técnicos (ASTM D 6751) o biodiesel é um combustível para motores diesel composto de ésteres monoalquilos de ácidos graxos de cadeia longa, derivados de óleos vegetais ou gorduras animais, designado como B100 e cumpre os requisitos da norma ASTM

D 6751. As propriedades do biodiesel são mostradas na Tabela 4.

Tabela 4 – Propriedades técnicas do biodiesel (Adaptado de (Demirbas, 2008))

| | |
|---|--|
| Nome comum | Biodiesel |
| Nome químico comum | Ácidos graxos de éster metílico |
| Faixa da fórmula química | $C_{14}-C_{24}$ ésteres metílicos ou $C_{15}-25$ $H_{28-48}O_2$ |
| Faixa de viscosidade cinemática [mm^2/s] a 313 K | 3,3 - 5,2 |
| Faixa de massa específica [kg/m^3] a 288 K | 860-894 |
| Faixa de ponto de ebulição [K] | >475 |
| Faixa de ponto de ignição [K] | 430-455 |
| Faixa de destilação [K] | 470-600 |
| Pressão de vapor [mmHg] a 295 K | <5 |
| Solubilidade em água | Insolúvel em água |

Uma variedade de biolípídeos podem ser usados para produzir o biodiesel, como óleo vegetal *in natura* (óleos de colza, soja, palma, girassol, cânhamo e algas), resíduos de óleo vegetal, gorduras animais e óleos não comestíveis (jatrofa, óleo de castor, etc). As principais desvantagens do biodiesel são a sua maior viscosidade, menor poder calorífico, maior ponto de névoa e ponto de fluidez, maior formação do óxido de nitrogênio (NOx), formação de incrustações no injetor, preço elevado e maior desgaste do motor. As desvantagens técnicas de misturas biodiesel-diesel fóssil incluem problemas com o congelamento do combustível em tempo frio, redução da densidade de energia e degradação do combustível armazenado por períodos prolongados. Um problema adicional é encontrado quando misturas são introduzidas pela primeira vez em equipamentos que têm uma longa história de uso de hidrocarbonetos derivados do petróleo devido a que os hidrocarbonetos criam uma camada de depósitos no interior de tanques, tubos, etc., e as misturas de biodiesel removem esses depósitos, causando bloqueio nos filtros de combustível.

2.2.3 Óleo vegetal

A utilização direta de óleos vegetais e/ou a utilização de misturas de óleos têm sido geralmente considerada como sendo não satisfatória e impraticável para motores a diesel de injeção direta e indireta. Os maiores problemas associados são: a alta viscosidade, a composição de ácido, o conteúdo de ácidos graxos livres, a formação de goma devido à oxidação e polimerização durante a armazenagem e a combustão, a deposição de carbono e espessamento do óleo.

Os óleos vegetais tornaram-se mais atraentes recentemente por causa de seus benefícios ambientais pelo fato de que eles são produzidos a partir de recursos renováveis. Mais de 100 anos atrás, Rudolph Diesel testou o óleo vegetal como combustível para seu motor. Os óleos vegetais têm o potencial de substituir uma fração dos destilados de petróleo e petroquímicos a base de petróleo num futuro próximo. A substituição de combustíveis convencionais derivados do petróleo por óleos vegetais é considerada como uma alternativa viável para diminuir a poluição e para suportar uma agricultura sustentável.

Os óleos vegetais são misturas complexas, nos quais os triglicéridos são o maior componente (perto de 98%), com componentes menores como polifenoles, aldeídos, esteroleos, compostos voláteis e ácidos graxos livres (1-5%). O maior componente (triglicérido) consiste em ácidos graxos, ligados a uma molécula de glicerol. Os ácidos graxos diferem um de outro no número de átomos de carbono e na cadeia de hidrocarbonetos, o grau de não saturação e a posição de duplas ligações de carbono nas varias cadeias. Os ácidos graxos sem ligações duplas de carbono são chamados saturados, e aquele com pelo menos uma ligação dupla é chamado não saturado, os quais podem ser mono insaturados ou poli insaturados. Os ácidos graxos comumente encontrados nos óleos vegetais são esteárico, palmítico, linoleico e linolênico.

O índice de iodo indica o grau de insaturação do óleo (número de duplas ou triplas ligações). Este índice corresponde ao número de gramas de iodo absorvido por 100 gramas de óleo.

Para o estudo do uso dos óleos vegetais é requerida informação do equilíbrio de fase de vapor-líquido e propriedades termo físicas, para operação dos equipamentos e projeto. Estes dados são importantes no processo de combustão, mas há poucas publicações para dados de ácidos graxos e o mesmo para os óleos vegetais.

As proporções dos ácidos graxos são diferentes para diferentes leguminosas. Óleos vegetais e gorduras de triglicéridos incluem não só os óleos vegetais comestíveis, mas também os não comestíveis e gorduras tais como óleo de linhaça, óleo de rícino e óleo de tungue, usado em lubrificantes, tintas, cosméticos, produtos farmacêuticos e outros fins industriais.

Uma comparação de algumas propriedades de combustível de óleos vegetais com combustível D2, esta na Tabela 5, onde é possível ver que o poder calorífico dos óleos vegetais são 88% do poder calorífico do D2. A massa específica dos óleos vegetais está entre

912 e 921 kg/m³, enquanto a massa específica do combustível D2 é 815 kg/m³. Os valores de viscosidade cinemática dos óleos vegetais variam entre 39,2 e 65,4 mm²/s a 300 K.

Tabela 5 – Propriedades de combustível D2 e óleos vegetais. (Adaptado de (Demirbas, 2008))

| Tipo de combustível | Poder calorífico [MJ/kg] | Massa específica [kg/m ³] | Viscosidade a 300 K [mm ² /s] | Número de Cetano |
|-------------------------|--------------------------|---------------------------------------|--|------------------|
| Combustível D2 | 43,4 | 815 | 4,3 | 47,0 |
| Óleo de girassol | 39,5 | 918 | 58,5 | 37,1 |
| Óleo de algodão | 39,6 | 912 | 50,1 | 48,1 |
| Óleo de soja | 39,6 | 914 | 65,4 | 38,0 |
| Óleo de milho | 37,8 | 915 | 46,3 | 37,6 |
| Óleo de papoila de ópio | 38,9 | 921 | 56,1 | - |
| Óleo de colza | 37,6 | 914 | 39,2 | 37,6 |

Diferentes métodos para reduzir a elevada viscosidade dos óleos vegetais têm sido considerados: diluição de 25 partes de óleo vegetal com 75 partes de óleo diesel, microemulsões com álcoois de cadeia curta, tais como etanol ou metanol, transesterificação com etanol ou metanol, que produz o biodiesel, pirólise e de craqueamento catalítico, que produz alcanos, cicloalcanos, alcenos e alquilbenzenos. Os resultados indicam que é obtida uma diminuição na viscosidade e também na massa específica do óleo vegetal, mas alguns dos processos não são suficientes para que ele seja usado como combustível em motores diesel.

Capítulo 3

ANÁLISE DO ESCOAMENTO NA ADMISSÃO E COMPRESSÃO

3.1 INTRODUÇÃO

No curso de admissão em um motor a combustão interna de ignição por compressão é admitido ar, o qual é comprimido no cilindro, e ao final da compressão ocorre a injeção do combustível. No processo de carga e descarga de gases no cilindro ao longo de um ciclo há variações das propriedades do gás, pelo fato de se ter variação temporal das áreas de passagem de escoamento nas válvulas de admissão e exaustão, assim como efeitos de inercia dos gases, além da variação da pressão na admissão e na exaustão. Os parâmetros globais que caracterizam a admissão e o escoamento no interior do cilindro são a eficiência volumétrica, coeficiente de descarga, razões de *swirl* e de *tumble*.

Um dos sistemas importantes na geração de condições de escoamento que melhorem a combustão no cilindro é o sistema de admissão. No curso de admissão, o escoamento é de forma pulsada e são criadas ondas de pressão que se deslocam ao longo do duto de admissão. O comprimento da onda de pressão depende da frequência do pulso e da vazão de massa. Quando as ondas atingem o fim do duto, são refletidas de volta para o cilindro e então as ondas primárias criadas desde o cilindro e as ondas refletidas podem se reforçar ou cancelar, dependendo de se elas estão em fase ou não. Se o comprimento do duto de admissão e a vazão de massa de ar é tal que as ondas reforçam-se no ponto onde o ar entra no cilindro através das válvulas, a pressão puxando o ar poderá ser ligeiramente mais alta e maior quantidade de ar poderá entrar no cilindro. Se isto ocorre o sistema é chamado de *tuned* ou sincronizado e a eficiência volumétrica é aumentada. No sistema de admissão, um dos componentes mais críticos é a válvula de admissão, por onde entra o ar ao cilindro e nesta região são geradas grandes velocidades no escoamento. Na Fig. 6a, são descritos os componentes básicos do motor os quais são conduto de admissão, conduto de exaustão, válvulas, cilindro e pistão.

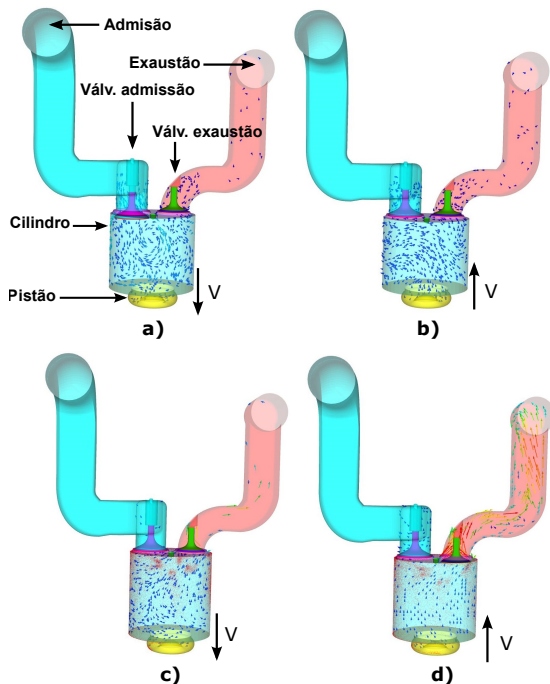


Figura 6 – Processos do ciclo do motor de 4 tempos. a) Admissão. b) Compressão. c) Expansão. d) Exaustão. (Fonte: Autor)

O coletor de admissão deve ser projetado corretamente, devido a que ele influencia na eficiência volumétrica e, conseqüentemente no desempenho do motor. O coletor de admissão tem características importantes como perda de carga de ar a qual está ligada à eficiência de consumo de combustível e às emissões do motor.

Ao longo da admissão há uma perda de carga gerada pelos componentes do sistema e esta depende da velocidade de rotação do motor. Na válvula de admissão o escoamento tem uma perda de carga, a qual é devida à velocidade e à forma do duto por onde passa o escoamento, como pode ser visto na Fig. 6a, onde é gerada alta velocidade na passagem do ar no válvula na fase de admissão, e na Fig. 6d, onde são mostradas altas velocidades na válvula na fase de exaustão. Os processos que acontecem no ciclo do motor de 4 tempos são descritos na Tabela 2, e na Fig. 6 é mostrado o comportamento do escoamento dependendo da fase do motor de

ignição por compressão.

A vazão de ar no processo de admissão está relacionada com a pressão e temperatura de estagnação e a pressão a jusante da válvula, que é assumida como a pressão no interior do cilindro. Também depende da área de referência que é característica da válvula, (Heywood, 1988) ou área de referência usada na admissão como na exaustão, a qual pode ser a área de cortina obtida por:

$$A_c = \pi D_v L_v, \quad (3.1)$$

onde, D_v é o diâmetro da válvula, L_v é a elevação da válvula a qual pode ser modelada em função do ângulo de manivela.

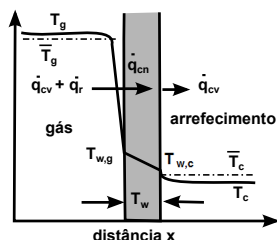


Figura 7 – Mecanismos de transferência de calor no motor. (Adaptado de (Heywood, 1988))

A transferência de calor entre o escoamento e as paredes é importante na identificação do estado termodinâmico. O calor é transferido do gás no interior do cilindro por convecção, condução e radiação, como é mostrado na Fig. 7, onde T_g é a temperatura do gás, $T_{w,g}$ é a temperatura da parede no lado do gás, $T_{w,c}$ é a temperatura da parede no lado do arrefecimento e T_c é a temperatura do líquido de arrefecimento.

3.1.1 Parâmetros globais de admissão e escoamento no cilindro

O movimento do gás no cilindro é um fator importante na combustão do motor diesel e portanto os cursos de admissão e compressão são importantes nas características turbulentas do escoamento, devido a que é o que define a mistura combustível-ar. Existem parâmetros que permitem quantificar os diferentes fenômenos que se apresentam no interior do cilindro, durante os processos de

admissão e compressão e os quais são importantes de se conhecer para compreender o que ocorre no cilindro.

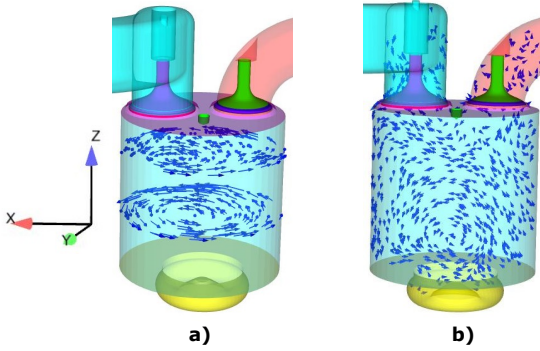


Figura 8 – a) *Swirl*. b) *Tumble*. (Fonte: Autor)

O coeficiente de descarga instantâneo (C_{Di}) é a relação entre a vazão real de ar que passa através da válvula de admissão (\dot{m}) e a vazão ideal correspondente a uma expansão isentrópica através da mesma área de passagem. Considerando a pressão de saída do ar como (p_T) e a pressão de estagnação na entrada de ar como (p_o), o coeficiente de descarga instantâneo de acordo com (Heywood, 1988) é

$$C_{Di} = \frac{\dot{m}}{\frac{A_R p_o}{(RT_o)^{1/2}} \left(\frac{p_T}{p_o}\right)^{1/\gamma} \left\{ \frac{2\gamma}{\gamma-1} \left[1 - \left(\frac{p_T}{p_o}\right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right] \right\}^{1/2}}, \quad (3.2)$$

onde A_R é a área característica da válvula, T_o é a temperatura de ar na entrada, γ é a razão de calores específicos a pressão e volume constantes.

O *swirl* é um movimento rotacional do gás em torno do eixo do cilindro, como é mostrado na Fig. 8a, e o qual contribui a melhorar a mistura combustível-ar. A razão de *swirl* (R_s), é um parâmetro adimensional que permite quantificar este movimento pela seguinte expressão, (Richards *et al.*, 2016) e (Pulkrabek, 1997)

$$R_s = \frac{\Omega_{esc}}{\Omega_{maniv}}, \quad (3.3)$$

onde Ω_{esc} é a velocidade de rotação do escoamento e Ω_{maniv} é a velocidade de rotação da manivela em rad/s.

No motor que tem a câmara de combustão perto da linha central do cilindro, quando o pistão se aproxima do PMS na compressão, o volume em torno dos outros eixos da câmara de combustão é reduzido a um valor muito pequeno, desta forma, o gás é forçado radialmente ao interior da câmara e este movimento radial é chamado de *squish*. Com o pistão perto do PMS o movimento de *squish* gera um escoamento rotacional secundário chamado *tumble*, perto do eixo externo da coroa do pistão, como mostrado na Fig. 8b. A razão de *tumble* (R_t) é um parâmetro adimensional que permite qualificar o movimento de rotação do gás entorno do eixo y (Razão de *tumble* y - R_{ty}) e entorno do eixo x (Razão de *tumble* x - R_{tx}). A R_{tx} é definida como a razão entre a velocidade de rotação do escoamento em torno do eixo x e a velocidade de rotação da manivela, e a R_{ty} é definida como a razão entre a velocidade de rotação do escoamento em torno do eixo y e a velocidade de rotação da manivela.

A eficiência volumétrica, definida na secção 2.1.1 é mais um parâmetro adimensional que mede a capacidade do motor de prover o máximo enchimento com ar.

3.1.2 Objetivo do capítulo

O objetivo principal deste capítulo é resolver o escoamento turbulento e compressível no interior do cilindro para os cursos de admissão e compressão, cujas variáveis médias são transientes, para o qual precisa-se de simulação numérica.

São determinados os parâmetros geométricos envolvidos no projeto, concernentes ao motor de combustão interna usado como protótipo para a modelagem, que corresponde ao motor que está no Laboratório de Combustão e Engenharia de Sistemas Térmicos - LABCET, definindo desta forma o domínio computacional para as simulações.

Finalmente, os resultados obtidos nas simulações numéricas para diferentes parâmetros (pressão, temperatura, energia cinética turbulenta, razão de *swirl*, razão de *tumble*) são comparados com algumas variáveis médias globais, medidas no motor e, também, com resultados de estudos similares, no intuito de validar os resultados numéricos.

3.1.3 Organização do capítulo

O capítulo está estruturado da seguinte forma: Inicialmente é apresentada uma revisão da modelagem de escoamento turbu-

lento em motores de combustão interna, descrevendo as equações governantes e as metodologias de solução numérica, concentrando a análise nos modelos (RANS) os quais serão usados na presente simulação.

Depois é feita uma revisão de trabalhos numéricos e experimentais sobre o escoamento turbulento em motores de combustão interna, principalmente os que foram feitos usando modelos RANS em motores diesel de injeção direta.

Posteriormente é descrita a modelagem e a metodologia de simulação, incluindo os parâmetros geométricos do motor, a subdivisão em regiões da geometria usada na simulação as características do método numérico, as condições de contorno e as condições iniciais.

Finalmente são apresentados os resultados obtidos e a análise destes resultados, levando em conta os parâmetros como eficiência volumétrica, coeficientes de descarga, campos de pressão, campo de temperatura, campo de velocidade, energia cinética turbulenta, *Swirl* e *Tumble*.

3.2 REVISÃO DA LITERATURA

Um modelo teórico dos processos de admissão e compressão num motor de combustão interna consiste em um conjunto de equações governantes que devem ser resolvidas com parâmetros de entrada, condições iniciais e de contorno. O maior resultado do modelo é a estrutura de campo de escoamento e parâmetros de escoamento, (Kuo & Acharya, 2012).

3.2.1 Modelagem de escoamento em motores

No cilindro de um motor a combustão interna o escoamento inclui interações complicadas de camadas turbulentas, região de recirculação e camadas limite, e o escoamento é instável e pode ter flutuações de um ciclo a outro, (Heywood, 1988).

Para a obtenção dos campos de velocidade, temperatura e pressão num escoamento é necessário solucionar um sistema de equações o qual consiste de equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e equação de estado. Para o escoamento compressível transitório as equações de conservação de massa e quantidade de movimento são as seguintes, (Richards *et al.*, 2016)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = S, \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + S_i, \quad (3.5)$$

onde u_i é a componente do vetor velocidade na direção i , S é o termo fonte na equação de conservação da massa que pode surgir a partir de evaporação e outros submodelos, S_i é o termo fonte na equação de quantidade de movimento que envolve a aceleração gravitacional, o acople de spray e fontes de massa e σ_{ij} é o tensor de tensão escrito como

$$\sigma_{ij} = \left(\mu' - \frac{2}{3}\mu \right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.6)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica, μ' é a viscosidade de dilatação (definida como zero), δ_{ij} é o delta de Kronecker.

Para a equação de estado é usada a equação de gases ideais ou uma equação para gases não ideais na forma

$$\frac{p}{\rho} = Z \frac{R}{W} T, \quad (3.7)$$

onde R é a constante universal dos gases, W é a massa molar e Z é o fator de compressibilidade (1.0 para gás ideal). Quando é usada a equação de estado de Redlich-Kwong o fator de compressibilidade é função de volume específico reduzido v_r e da temperatura reduzida T_r , obtida como (Richards *et al.*, 2016)

$$Z = \frac{v_r}{v_r - 0.08664} - \frac{0.42748}{(v_r + 0.08664)T_r^{3/2}}, \quad (3.8)$$

$$v_r = \frac{p_c v}{RT_c}, \quad (3.9)$$

$$T_r = \frac{T}{T_c}, \quad (3.10)$$

onde T_c é a temperatura crítica, p_c é a pressão crítica e v é o volume específico.

A equação de conservação de energia é

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j e}{\partial x_j} = -p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \\ + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \mathcal{D} \sum_m h_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + S_o, \end{aligned} \quad (3.11)$$

onde Y_m é a fração de massa da espécie m , \mathcal{D} é o coeficiente de difusibilidade de massa, k é a condutividade térmica, e é a energia interna específica, h_m é a entalpia da espécie m e S_o é o termo fonte.

Denotando ℓ_{EI} como a escala de comprimento que demarca o limite das grandes estruturas (escalas de comprimento no escoamento turbulento) onde as estatísticas variam de acordo à direção em que são examinadas (estruturas anisotrópicas $\ell > \ell_{EI}$) e as pequenas estruturas isotrópicas da turbulência ($\ell < \ell_{EI}$), a faixa onde há pequenas estruturas isotrópicas é definida como a faixa de equilíbrio universal, segundo Kolmogorov, (Deschamps, 2014). Nesse intervalo as escalas de tempo ℓ/u_ℓ são pequenas quando comparadas com L/u_o , podendo rapidamente manter um equilíbrio dinâmico com a taxa de transferência de energia das grandes estruturas. Dados os parâmetros de viscosidade cinemática ν , e taxa de dissipação de energia cinética turbulenta ε , as escalas de comprimento, velocidade e tempo podem ser determinadas de forma única, e são referenciadas como escalas de Kolmogorov (Primeira hipótese de similaridade de Kolmogorov).

$$\ell_k = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4} \quad u_k = (\nu\varepsilon)^{1/4} \quad \tau_k = \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2} \quad (3.12)$$

Para Números de Reynolds (Re) elevados, o tamanho das pequenas escalas (ℓ_k) é muito menor que o tamanho das grandes escalas ou escala integral (ℓ_o), as quais são uma medida da estrutura da maior escala do campo de escoamento turbulento, a qual caracteriza a separação espacial requerida para decorrelação significativa das flutuações de velocidade. Existe uma faixa de escalas muito pequenas comparadas com ℓ_o e muito grandes comparadas com ℓ_k , ou seja $\ell_o \gg \ell \gg \ell_k$. Considerando que $\ell \gg \ell_k$ supõe-se que Re sejam elevados e, assim seus movimentos pouco afetados pela viscosidade.

A ligação entre as duas escalas turbulentas é fornecida pela cascata de energia turbulenta das grandes escalas às pequenas escalas. A energia cinética do escoamento é dissipada por atrito viscoso e é determinada principalmente pelas grandes escalas do escoamento. Assim, a energia cinética turbulenta das grandes escalas é dissipada pela viscosidade nas pequenas escalas.

3.2.2 Modelagem e solução numérica de escoamento turbulento

As equações que descrevem o escoamento turbulento são as equações de Navier-Stokes em forma não estacionária e tridimensional, as quais precisam de solução em escalas pequenas (temporais e espaciais) para obter a descrição do escoamento em detalhes, em função do tempo e espaço.

As metodologias de solução numérica de escoamentos turbulentos são: simulação numérica direta (*Direct Numerical Simulation-DNS*), simulação de grandes escalas (*Large Eddy Simulation-LES*) e modelos usando as Equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds (*Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations-RANS*).

Simulação numérica direta. A simulação numérica direta do escoamento a partir das equações do escoamento turbulento pode ser realizada, mas precisa de recurso computacional grande pelo fato de se requerer níveis de discretização espacial e temporal muito pequenos, sendo limitada a certos números de Reynolds e tamanho do domínio computacional (a maioria dos escoamentos apresentam estruturas de movimento com amplas faixas de escala de comprimento e tempo), (Crowe *et al.*, 2012).

A solução das equações de Navier-Stokes é a forma mais direta para simular escoamentos turbulentos e no caso de escoamento compressível, a solução numérica envolve a equação de estado para gás ideal e não necessita de modelos de turbulência, portanto as únicas fontes de erro introduzidas são as aproximações numéricas geradas pela discretização das equações.

Simulação de grandes escalas. Nesta metodologia de simulação, o movimento das grandes escalas é resolvido na forma de um escoamento tridimensional e transiente e as discretizações espaciais e temporais são aplicadas somente nestas escalas (nas grandes escalas), e para as menores escalas o tratamento é feito com modelos algébricos, minimizando a demanda de recursos computacionais. Esta metodologia simula os vórtices maiores e modela os vórtices menores. O fundamento da LES é baseado no conceito da cascata de energia, no qual, a energia gerada pelas grandes estruturas turbulentas é dissipada pelas menores escalas de turbulência.

Partindo das ideias de Reynolds, a simulação de grandes escalas ao invés de decompor o escoamento num campo médio somando as flutuações, separa as escalas de frequências altas daquelas de frequências baixas, com um processo de filtragem.

Equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds.

É uma modelagem de escoamento baseado na decomposição das equações de Navier-Stokes quando é substituída em elas a velocidade instantânea como uma média somada a uma flutuação. A característica importante no escoamento turbulento é a irregularidade ou aleatoriedade, e por tanto os métodos estatísticos são usados nas grandezas físicas envolvidas para definir o campo de escoamento, onde essas grandezas são definidas como a soma da média e da flutuação instantânea. Por exemplo, no caso de escoamento turbulento em regime permanente a velocidade local instantânea (u) do fluido numa direção específica é a soma da velocidade média (\bar{u}) e a flutuação da velocidade (u'), (Bejan, 2013), a qual é denominada decomposição de Reynolds, onde a ideia de Reynolds foi decompor cada propriedade da seguinte forma

$$u = \bar{u} + u'. \quad (3.13)$$

Para escoamentos nos quais os efeitos da compressibilidade são importantes, além das flutuações da velocidade e da pressão, é necessário levar em conta as flutuações da massa específica e temperatura. Na média de Favre qualquer propriedade do escoamento é expressa como o somatório de um valor médio e uma flutuação, ambos ponderados pela massa específica. Definindo o termo de velocidade média ponderada pela massa como \tilde{u}_i e a massa específica média convencional de Reynolds como $\bar{\rho}$, é possível expressar $\bar{\rho}\tilde{u}_i = \overline{\rho u_i}$, onde a barra superior denota a média convencional de Reynolds. Expandindo o lado direito como o indicado no processo de média de Reynolds (Equação (3.13)) é obtido: $\bar{\rho}\tilde{u}_i = \bar{\rho}u_i + \overline{\rho' u_i'}$. Uma quantidade instantânea como, por exemplo, a velocidade pode ser escrita como a soma de um valor médio ponderado pela massa \tilde{u}_i e uma flutuação u_i'' , (Wilcox, 1993; Kuo & Acharya, 2012), desta forma

$$u_i = \tilde{u}_i + u_i''. \quad (3.14)$$

A velocidade média de Favre ou velocidade média ponderada pela massa é escrita como

$$\tilde{u}_i = \frac{\overline{\rho u_i}}{\bar{\rho}}. \quad (3.15)$$

Partindo das equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia instantâneas (Equações (3.4), (3.5) e (3.11)),

e com a substituição da decomposição das propriedades como ($u_i = \tilde{u}_i + u_i''$), ($\rho = \tilde{\rho} + \rho'$), ($q_j = q_{Lj} + q_j'$), ($p = \tilde{p} + p'$), ($h_i = \tilde{h} + h''$), ($T = \tilde{T} + T''$), ($e = \tilde{e} + e''$), são obtidas as equações de conservação em médias de Favre. As equações de conservação da massa e conservação da quantidade de movimento para escoamento compressível em termos de médias de Favre, podem ser escritas como, (Wilcox, 1993), (Richards *et al.*, 2016):

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = & -\frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\tilde{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''} \right), \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{e}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_j \tilde{\rho} \tilde{e}}{\partial x_j} = & -p \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} + \sigma_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tilde{\rho} \mathcal{D} \sum_m \tilde{h}_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + S, \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\tilde{p} = \tilde{\rho} R \tilde{T}, \quad (3.19)$$

onde σ_{ij} é o tensor de tensão. Nestas equações é obtido um termo adicional chamado de Tensor de Reynolds, definido como

$$R_{ij} = -\tilde{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''} \quad (3.20)$$

O tensor de Reynolds representa o transporte médio da quantidade de movimento devido às flutuações turbulentas da velocidade e é composto por seis incógnitas escalares que geram um problema para o fechamento do sistema de equações. O sistema de equações pode ser resolvido usando modelos de turbulência com expressões para o tensor de Reynolds, ou usando as equações de transporte para o tensor de Reynolds em termos da média de Favre, as quais são

escritas como

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\tilde{u}_k R_{ij}) &= -R_{ik} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} - R_{jk} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \varepsilon_{ij} \\ &- \Pi_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[-(\overline{\tau_{kj} u_i'' + \tau_{ki} u_j''}) + C_{ijk} \right] + \overline{u_i''} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_j} + \overline{u_j''} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

No sistema de equações de média de Favre, não é possível determinar o campo médio sem conhecer o tensor de Reynolds R_{ij} (Equação (3.20)). Num problema tridimensional há quatro incógnitas das propriedades médias do escoamento (pressão e as três velocidades), e também há seis componentes do tensor de Reynolds (desconhecidas), para um total de dez variáveis desconhecidas, com quatro equações.

A solução do sistema usando RANS pode ser feita de duas formas: com modelos de equação de transporte para cada um dos termos de tensor de Reynolds (*Reynolds Stress Models - RSM*), ou usando modelos de viscosidade turbulenta baseado na hipótese de Boussinesq.

Quando para o fechamento do problema é usado o modelo *RSM*, as equações adicionais são obtidas das equações diferenciais do transporte para o tensor de Reynolds, ou Equação (3.21), (Wilcox, 1993).

A segunda opção para o fechamento do sistema de equações é usar os modelos de viscosidade turbulenta, onde são considerados modelos baseados na hipótese de Boussinesq, a qual estabelece que em turbulência totalmente desenvolvida o tensor médio de Reynolds é proporcional ao tensor médio viscoso. Para fechar o problema, uma aproximação usando a proposta de Boussinesq, é expressar o tensor de Reynolds com o conceito de que a transferência de quantidade de movimento devido à turbulência é similar ao transporte molecular, onde ν_t é a viscosidade cinemática turbulenta, usando a seguinte equação

$$-\overline{u_i'' u_j''} = \nu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.22)$$

Para usar a equação anterior é necessário conhecer ν_t , a qual se espera que seja determinada pelas propriedades da turbulência, e a expressão para ν_t depende do modelo de turbulência a ser usado.

3.2.2.1 Modelos de viscosidade turbulenta

Para o cálculo da viscosidade turbulenta são usados modelos como, por exemplo, o modelo proposto por Kolmogorov o qual é uma generalização da hipótese de Boussinesq no modelo de turbulência $k - \varepsilon$ padrão. Neste modelo k é a energia cinética turbulenta, ε é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta e μ_t é viscosidade dinâmica turbulenta. De acordo com a hipótese de Boussinesq, a modelagem do tensor médio de Reynolds em média de Favre, é escrito como

$$R_{ij} = -\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right), \quad (3.23)$$

$$k = \frac{\overline{u_i'' u_j''}}{2}. \quad (3.24)$$

A expressão para o cálculo da viscosidade turbulenta depende do modelo de turbulência, e os modelos mais comumente usados para simulação de escoamentos turbulentos são $k - \varepsilon$, $k - \varepsilon RNG$, $k - \omega$.

O **Modelo** $k - \varepsilon$ é um modelo semiempírico baseado nas equações de transporte para energia cinética turbulenta (k) e na taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε). A viscosidade turbulenta é modelada como uma relação da energia cinética turbulenta e a dissipação de energia cinética turbulenta usando uma constante de turbulência do modelo (C_μ), mediante a seguinte equação, (Wilcox, 1993)

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (3.25)$$

Neste modelo é resolvida uma equação de transporte para energia cinética turbulenta (k), e outra equação de transporte para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε). Estas duas equações têm o formato normal de uma equação de transporte incluindo termos de variação temporal, advectivos e difusivos assim como termos fontes e outros termos adicionados a partir de considerações físicas e numéricas.

O **Modelo** $k - \varepsilon RNG$ utiliza uma teoria denominada técnicas de renormalização do grupo ou *Renormalization Group - RNG*, é uma variante do modelo $k - \varepsilon$ proposto por Yakhot e Orzag (1986) e tem a vantagem que tanto a constante como as funções empregadas são obtidas teoricamente e não empiricamente como no modelo $k - \varepsilon$.

3.2.3 Trabalhos de simulação numérica do escoamento em MCI

Em motores de combustão interna têm-se escoamento nos dutos de admissão e exaustão e no interior do cilindro. Com a simulação do escoamento no motor, são obtidos os campos de velocidade, pressão e temperatura nos dutos e no cilindro, além de informações adicionais no cilindro como transferência de calor, *swirl* e *tumble* entre outros.

Com o objetivo de analisar num motor diesel o efeito da forma do pistão no movimento e turbulência do escoamento no interior do cilindro, (Sushma & Jagadeesha, 2013), fizeram a simulação da admissão e compressão do motor usando *ANSYS (FLUENT)* com o modelo $k - \varepsilon$ *RNG*, para três configurações de pistão e foram obtidos campos de temperatura, pressão, razão de *swirl*, *tumble*, energia cinética turbulenta e eficiência volumétrica. Esses autores concluíram que o pistão com a configuração da cabeça igual à usada no presente trabalho gera alto *swirl* no final da compressão e tem alta eficiência volumétrica quando comparado com outras configurações de pistão.

No estudo das características acústicas e a continuidade do escoamento no coletor de admissão de um motor diesel, é mostrado de forma experimental para dois coletores de admissão que estes parâmetros têm influência no torque do motor e que o comportamento dinâmico na admissão do motor tem relação com a propagação de ondas acústicas no coletor de admissão, (Santos *et al.*, 2013).

Testes experimentais da influência do duto de admissão na eficiência volumétrica do motor foram feitos por (Pesic *et al.*, 2013), onde foi testado um motor de um cilindro sem combustão e foi concluído que com o aumento da velocidade do motor aumenta a amplitude da oscilação de pressão no coletor de admissão e que para aumentar a eficiência volumétrica é necessário que o movimento de fechamento da válvula esteja sincronizado com a oscilação de pressão.

O coletor de admissão foi simulado em regime permanente, e a pressão dentro do duto comparada com dados experimentais por (Karthikeyan *et al.*, 2011), obtendo a variação de pressão com o ângulo de manivela no duto de admissão e estes dados foram usados para obter as características do escoamento no software *CFX*.

Para o estudo da influência da câmara de combustão num motor diesel de injeção direta, foi feita a simulação numérica usando

FLUENT e o modelo $k - \varepsilon$ junto à análise experimental do motor por (Fernández & Marcos, 2010) para obter campos de pressão, temperatura, velocidade e intensidade turbulenta com duas câmaras de combustão diferentes.

O curso de admissão e compressão para um motor de injeção direta foi simulado por (Jayashankara & Ganesan, 2010) em *Star-CD* usando o modelo $k - \varepsilon RNG$, comparando razão de *swirl*, velocidade radial e intensidade turbulenta no interior do cilindro com dados medidos usando *Laser Doppler Velocimetry (LDV)*. A combustão foi analisada para diferentes tempos de injeção e foi observado que para um maior tempo de injeção (SOI) são obtidas as maiores pressões e temperaturas, e que para um aumento na pressão da admissão aumenta a pressão no cilindro e diminui a temperatura.

O escoamento tridimensional compressível para um motor de combustão interna foi simulado em diferentes posições de elevação da válvula de admissão, por (Rech, 2010) no intuito de analisar o comportamento dinâmico do escoamento e da transferência de calor em motores a combustão interna, usando modelos RANS $k - \varepsilon$ e $k - \varepsilon RNG$ no software *ANSYS (FLUENT)*. Verificou-se que o coeficiente de descarga aumenta com a elevação da válvula e no campo de velocidade foi observada uma recirculação no lado oposto da válvula de admissão devido à interação do escoamento com a parede do cilindro. Também foram obtidos os campos de velocidades e pressão, os efeitos sobre os escoamentos de *swirl* e *tumble* foram observados.

Usando o software *Star-CD* com os modelos de turbulência $k - \varepsilon$ e $k - \omega SST$, foi simulado um motor diesel de características similares às anteriores, por (Zancanaro, 2010), onde foram obtidos os campos de velocidades, pressão, e energia cinética turbulenta no processo de admissão de ar. Foi observado que a geometria do motor usada na simulação favorece o movimento *squish* na compressão, e que o coletor de admissão helicoidal força o fluido a rotacionar (*swirl*). Ao comparar os resultados com dados experimentais, principalmente para o coeficiente de descarga e a razão de *swirl*, não foram observadas diferenças significativas.

Para um motor a combustão interna a gás (ignição por centelha) foi feita uma formulação bidimensional com geometria axissimétrica, e sua simulação numérica usando *ANSYS (FLUENT)* com o modelo de turbulência $k - \varepsilon RNG$, por (Bertoldi, 2007). Como resultado, foram obtidas as curvas de pressão e temperatura no interior do cilindro para o motor com combustão, e comparadas ao

motor sem combustão. Adicionalmente foram analisados os fluxos de calor dos gases para as paredes em contato com a câmara de combustão, campos de velocidades, campos de intensidade turbulenta, e a influência de parâmetros de operação do motor, como ponto de ignição, temperatura da parede, composição da mistura combustível-ar.

O escoamento no curso de admissão e compressão foi simulado para um motor diesel de um cilindro de injeção direta com diferentes câmaras de combustão por (Payri *et al.*, 2004), e foi observado que o pistão que tem a forma da taça (*bowl*) é o mais importante na geração de *swirl* ao final do curso de compressão pela forma da câmara de combustão. Os resultados da simulação foram comparados com dados experimentais obtidos com *Laser Doppler Velocimetry* para os diferentes pistões.

3.3 MODELAGEM E METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

Para a solução numérica das equações governantes de escoamento turbulento no motor a combustão interna, no presente trabalho foi usada a abordagem RANS com modelo de turbulência $k - \varepsilon$ *RNG*, resolvido numericamente pelo software *Converge CFD*, o qual é um programa de dinâmica de fluidos computacional que foi desenvolvido com o foco em simulações de motores de combustão interna, possui um gerador de malha automático, amplamente testado, com geração de malha ortogonal estruturada em tempo real baseada em parâmetros dados pelo usuário.

O programa utiliza o método de volumes finitos, com o qual é resolvida a forma integral das equações de conservação. O método de volumes finitos faz um balanço que satisfaz a conservação num volume de controle, por exemplo, considerando a equação de conservação de massa,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (3.26)$$

esta equação é integrada em um domínio discretizado em um número finito de volumes de controle, e as equações de conservação são aplicadas e resolvidas em cada volume. Nesta equação ρ representa a variável a ser transportada/resolvida. A forma integral da equação é resolvida somando os fluxos nas faces de cada célula e para obter o valor da variável nas superfícies do volume de controle, seu valor deve ser interpolado usando o valor das variáveis nos nodos. Para

levar a cabo a interpolação há diferentes opções. Desta forma é obtida uma equação para cada volume de controle, onde aparece o valor da variável do nó e dos nós vizinhos.

3.3.1 Geometria do motor

O motor a ser simulado, corresponde ao motor que se encontra na bancada experimental no Laboratório de Combustão e Engenharia de Sistemas Térmicos - LABCET, acoplado a um dinamômetro eletromagnético marca Schenk, modelo W70, com sistema de arrefecimento de bombeamento de água para o motor e o dinamômetro. As especificações do motor são dadas na Tabela 6.

Tabela 6 – Especificação do motor. (Fonte: Autor)

| Item | Especificação |
|-----------------------|------------------------------|
| Marca | Yanmar, modelo YT22E |
| Classificação | Diesel, 4 tempos, 1 cilindro |
| Sistema de injeção | Direta |
| Diâmetro do cilindro | 115 mm |
| Curso | 115 mm |
| Cilindrada | 1194 cm ³ |
| Relação de compressão | 17,3 |
| Potência contínua | 14,7 kW (20 CV)/2200 rpm |
| Potência intermitente | 16,2 kW (22 CV)/2200 rpm |

O sistema de injeção do motor é regulado a 180 bar de pressão, com um sistema de alimentação de combustível que permite medir a vazão e aquecer o combustível se requerido. No cilindro do motor tem se instalado um sensor piezelétrico marca Kistler modelo 6041A, com o qual foi feita a medição de pressão no cilindro do motor em diferentes regimes de operação.

A geometria do motor para a simulação é tridimensional, foi desenhada inicialmente em *SolidWorks* com as dimensões reais, e posteriormente levada a *Converge CFD* para seu pré e pós-processamento. Na Fig. 9 pode se observar que a geometria está formada pelo duto de admissão, cilindro, pistão, duto de exaustão, válvula de admissão e válvula de exaustão principalmente. A câmara de combustão se encontra na cabeça do pistão e é do tipo taça (*bowl*). Ao ser o pistão uma fronteira móvel, seu movimento entre o PMI e PMS em *Converge CFD* é feito com a escolha da opção de movimento de *piston*, onde é gerado o movimento de acordo

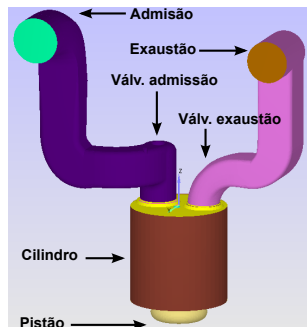


Figura 9 – Geometria tridimensional para simulação. (Fonte: Autor)

à velocidade de rotação do motor, para um ciclo do motor em 720° . Para a válvula de admissão e exaustão foi medida de forma experimental a abertura (*lift*) de cada uma de elas, para obter a abertura de válvula em função do ângulo de manivela como pode ser visto na Fig. 13, e esta função foi inserida no software de simulação para obter o movimento de cada uma das válvulas.

A injeção de combustível no motor é feita por um injetor de 5 furos, e a posição de cada um dos furos corresponde à posição real no motor. Os furos têm um diâmetro de 0,3 mm, e cada um dos furos tem diferente comprimento. Os dados geométricos do injetor foram obtidos com análise de microtomografia de raios X no Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termo-físicas (LMPT) da UFSC. A geometria do injetor é mostrada na Fig. 10.

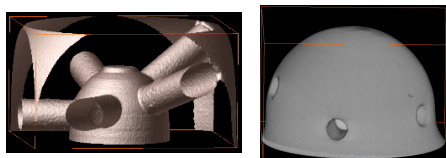


Figura 10 – Tomografia do injetor. (Fonte: LMPT)

Levando em conta a posição de todos os furos do injetor no interior do cilindro do motor, para seu posicionamento e direção foi obtido o centro do furo e o vetor normal, e posicionados na superfície da geometria do injetor conhecendo o diâmetro deles.

3.3.2 Características do modelo numérico

A simulação do escoamento no curso de admissão e compressão do motor diesel foi feita para velocidades de 1800 rpm e 2100 rpm. Com o objetivo de obter o curso de admissão de forma completa, a simulação inicia antes da exaustão, em -640° de ângulo de manivela para evoluir até o curso de admissão que ocorre entre -360° e -180° e curso de compressão que ocorre entre -180° e 0° , como mostrado na Fig. 13, e a simulação termina em -20° (ao final do curso de compressão). O final da simulação é feito em -20° o que corresponde a um ponto antes do início da injeção de combustível com o objetivo de obter o arquivo escrito ao final da simulação (*map.out*), o qual pode ser usado para a inicialização de uma nova simulação. O arquivo *map.out* contém para cada célula no domínio computacional o valor das variáveis ($p, T, v, \text{species}, k, \varepsilon$) em -20° . Com este arquivo foram inicializadas as simulações de spray de combustível e de combustão, descritas nos seguintes capítulos.

A função de interpolação no tempo é feita com uma formulação totalmente implícita, a qual da origem a um sistema linear de equações. Para a solução implícita das equações algébricas é usada uma técnica iterativa onde o sistema requer ser resolvido em cada intervalo de tempo. No software de simulação é usado como parâmetro de avanço no tempo o ângulo de manivela em *graus*, onde o intervalo de tempo é variável usando um tempo mínimo e um tempo máximo de acordo com a Tabela 7. O modelo é composto

Tabela 7 – Intervalos de tempo de simulação. (Fonte: Autor)

| Item | 1800 rpm | 2100 rpm |
|--|-------------------|-------------------|
| Intervalo inicial de tempo [s] / [graus] | 1,0e-6 / 0,0108 | 8,7e-7 / 0,01096 |
| Tempo mínimo [s] / [graus] | 2,0e-8 / 0,000216 | 1,7e-8 / 0,000214 |
| Tempo máximo [s] / [graus] | 4,9e-5 / 0,5292 | 4,2e-5 / 0,5292 |

pelas equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds (RANS), usando o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ RNG. Neste modelo a viscosidade turbulenta é modelada com a equação (3.25) e a equação de transporte para energia cinética turbulenta (k), e para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε) são

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho \tilde{u}_j k}{\partial x_j} = R_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \rho \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + S_k, \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \rho \tilde{u}_j \varepsilon}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Pr_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{\varepsilon 3} \rho \varepsilon \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \\ &+ \left(C_{\varepsilon 1} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} R_{ij} - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + c_k S_k \right) \frac{\varepsilon}{k} + S - \rho R, \end{aligned} \quad (3.28)$$

onde Pr_k e Pr_ε são números de Prandtl turbulento, $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, $C_{\varepsilon 3}$ são constantes do modelo, S_k é o termo fonte que representa as interações com a fase discreta (spray), S é o termo fonte fornecido pelo usuário. A constante do modelo c_k , quando é definida como zero para a solução do sistema anula o termo fonte S_k das equações de k e ε . O número de Prandtl turbulento foi usado com um valor de 0,72 para todas as simulações feitas no presente trabalho.

A variável R é dada por

$$R = \frac{C_\mu \eta^3 (1 - \eta/\eta_0) \varepsilon^2}{(1 + \beta \eta^3) k}, \quad (3.29)$$

$$\eta = \frac{k}{\varepsilon} \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}}, \quad (3.30)$$

onde S_{ij} é o tensor de tensão médio escrito como

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.31)$$

O termo fonte S_k nas equações anteriores representa as interações da turbulência com a fase discreta. η_0 e β são coeficientes empíricos do modelo, (Cebeci, 2004).

Para a solução do sistema de equações em escoamento compressível é usada a equação de estado de Redlich-Kwong (Equação (3.7)). Para o acoplamento pressão-velocidade é usado algoritmo PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*), (Versteeg & Malalasekera, 1995), e para a solução da pressão é usado o método de *multigrid*.

As características do escoamento têm dependência do tamanho de malha o que faz difícil escolher a malha adequada para utilizar na simulação. A dependência da malha dos valores de parâmetros do campo do escoamento é verificada com o objetivo de definir o tamanho de malha adequada para a simulação dos processos de admissão e compressão. Para tal efeito são usadas malhas base de 6, 4 e 3 mm utilizando em cada caso AMR com uma escala de 2 no

interior do cilindro, onde a malha base é relacionada com a malha AMR da seguinte forma $dx_{AMR} = dx_{base}2^{-(escala)}$.

A Fig. 11 mostra a pressão máxima no cilindro em função do ângulo de manivela para a simulação do motor em 1800 rpm com os três tamanhos de malha base. Nesta figura é mostrado que no caso de malha grosseira (6 mm) na comparação dos valores de pressão máxima no cilindro, estes valores tem uma significativa diferença (9%) com os valores obtidos usando malha de 4 mm e de 3 mm. Com o refino da malha a 4 mm é mantida a tendência da linha de pressão sendo estes resultados quase iguais aos obtidos com o refino de 3 mm como mostrado na figura.

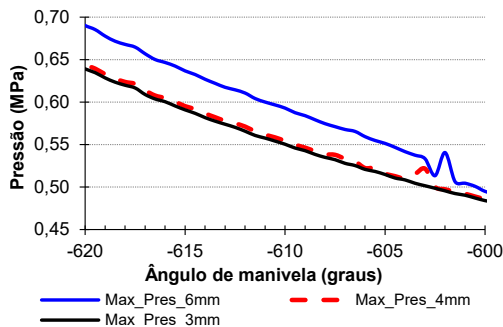


Figura 11 – Pressão máxima em função do ângulo de manivela para três tamanhos de malha usados. (Fonte: Autor)

Na Fig. 12 se mostra a energia cinética turbulenta (TKE) em função do ângulo de manivela e se têm o mesmo comportamento que a pressão, onde para a malha grosseira (6 mm) apresenta valores de energia cinética turbulenta maiores que quando a malha é refinada. Quando a malha é refinada a 4 mm e 3 mm, a linha de TKE têm a mesma tendência mas para estes dois tamanhos de malha o valor de TKE é quase idêntico. Para a malha base de 3 mm é gerada maior quantidade de volumes no domínio computacional.

Em termos de quantidade de volumes no domínio computacional na análise das três malhas base, de acordo aos resultados é contabilizada a quantidade de volumes em uma posição quando o pistão encontra-se 60° antes do PMI. Para a malha base de 6 mm se têm 410000 volumes, para malha base de 4 mm se têm 1299000 volumes e para malha base de 3 mm se têm 3018000 volumes, podendo ver que a diferença em quantidade de volumes entre a simulação

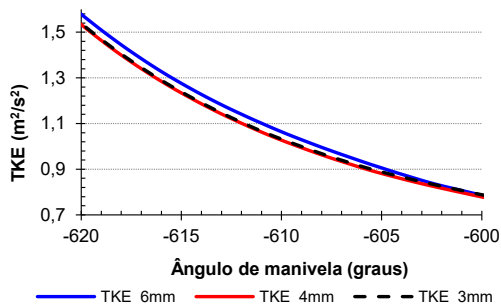


Figura 12 – Energia cinética turbulenta em função do ângulo de manivela para três tamanhos de malha usados. (Fonte: Autor)

com 4 mm e com 3 mm é bem grande.

Considerando a anterior análise de dependência da malha dos valores destes dois parâmetros do escoamento se pode concluir que para a simulação é possível utilizar malha base de 4 mm já que não mostra diferença nas variáveis analisadas em relação à quando usada malha base de 3 mm.

Para a simulação é usado o Computador DELL T7000 de 6 núcleos com 3,0 GHz de velocidade de processador e 48 GB de memória RAM.

O procedimento de construção de malha consiste em definir uma malha base de 4 mm para todos o eixos, e com esta malha base, levando em conta as variações de velocidade e de temperatura em toda a geometria é usada a metodologia de refinamento de malha *Adaptive Mesh Refinement (AMR)* baseado nas flutuações de estas duas variáveis para refinar a malha até 1 mm quando as variações atingem um valor máximo estabelecido. De igual forma, com o objetivo de refinar a malha no ponto de maiores velocidades do escoamento nas válvulas de admissão e exaustão, é feito um refino de malha usando *fixed embedding* permanente nestas paredes com malha de 0,5 mm. Em toda a região do cilindro é usado *fixed embedding* permanente de 1 mm.

A simulação para cada caso é feita em paralelo usando HPMPPI, e o tempo médio de cada simulação de escoamento é de 254 h.

3.3.3 Condições de contorno do modelo

Na solução das equações para o escoamento turbulento no motor de ignição por compressão são consideradas as seguintes fronteiras: entrada de escoamento (*Inflow*), saída de escoamento (*Outflow*) e paredes (*Wall*). As condições de contorno para as equações diferenciais parciais podem ser de um valor específico ou de valor específico da primeira derivada para as diferentes variáveis transportadas (pressão, velocidade, temperatura, energia, etc.).

Parede. A fronteira de parede pode ser fixa ou móvel, no caso do motor de combustão interna as fronteiras móveis são o pistão e as válvulas de admissão e exaustão.

As condições de contorno de velocidade para a parede é tratada com a lei da parede. A lei da parede, como tratamento da condição de contorno é usada para escoamentos turbulentos com números de Reynolds relativamente altos. Em escoamento turbulento na região próxima à parede sólida é caracterizada por pequenas escalas de comprimento e altas frequências, e é dividida em três sub regiões que são subcamada viscosa, camada de amortecimento e região turbulenta. Para altos números de Reynolds eventualmente é caro computacionalmente resolver o escoamento debaixo da subcamada viscosa o qual é necessário para uma solução correta. Nos modelos de turbulência são usadas funções de parede para representar a distribuição de velocidade, temperatura, energia, etc., dentro da camada limite e a lei da parede é uma função logarítmica da camada limite turbulenta (Launder and Spalding, 1974).

O perfil de lei da parede é usado para determinar os componentes tangenciais do tensor de tensão (σ_{ij}) na parede.

Para os modelos de turbulência $k - \varepsilon$ a lei da parede padrão é dada por:

$$u^* = \begin{cases} \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^+) & y^+ > 11.2 \\ y^+ & y^+ \leq 11.2 \end{cases}$$

onde, $E = 9,8$ é uma constante empírica, κ é a constante de Von Karman (0,4187), e as variáveis adicionais estão dadas como

$$u^* = \frac{U_{i,tang} \rho u_\tau n_j}{\sigma_{ij}}, \quad (3.32)$$

$$y^+ = \frac{y \rho u_\tau}{\mu}, \quad (3.33)$$

$$u_\tau = C_\mu^{1/4} k^{1/2}, \quad (3.34)$$

$$U_{i,tang} = U_i - (U_j n_j) n_i, \quad (3.35)$$

onde σ_{ij} é o tensor de tensão, u_τ é a velocidade de cisalhamento, $U_{i,tang}$ é a velocidade tangencial relativa.

O movimento do pistão e das válvulas de admissão e exaustão requer que a geometria e a malha se adaptem com o tempo e por tanto em *Converge CFD* o pistão é definido como fronteira com movimento e o software internamente gera uma tabela da posição do pistão. Para o movimento das válvulas, a elevação da válvula foi dada ao software em função de ângulo de manivela, como pode se observar na Fig.13 para a válvula de admissão.

As fronteiras que formam a geometria do motor são as paredes dos seguintes componentes: cilindro, pistão, cabeçote, injetor, válvula de admissão, válvula de exaustão, duto de admissão, duto de exaustão, entrada de escoamento (*inflow*) e saída de escoamento (*outflow*).

Para cada uma das paredes que formam as fronteiras do sistema, a temperatura que foi usada como condição de contorno corresponde à temperatura média do componente sólido (por exemplo, para o pistão sólido a temperatura média nele é usada como condição de contorno na parede do pistão).

As temperaturas médias de cada componente sólido do motor foram obtidas fazendo a simulação de transferência de calor no motor para uma geometria completa do motor na qual são usadas paredes sólidas e sem dutos de água de arrefecimento, em *Converge CFD* usando o modelo de transferência de calor conjugado (*Conjugate Head Transfer*), e o procedimento desta simulação é descrito no Apêndice A. Com a metodologia *Conjugate Head Transfer* foram resolvidos simultaneamente os campos de temperaturas da parte sólida e fluida no motor considerando combustão, a qual foi simulada usando a taxa de liberação de calor (HRR) em função do ângulo de manivela. Na simulação de transferência de calor são usadas condições iniciais e de contorno para os gases no cilindro, para as paredes sólidas de acordo ao descrito no Apêndice A. A simulação de transferência de calor foi feita para um total de 25 ciclos do motor, com o objetivo de que a temperatura nas paredes sólidas atinja um regime permanente, de acordo ao descrito no Apêndice A.

Continuando com a relação de condições na simulação de escoamento no motor, como condições de contorno na entrada do coletor de admissão do motor, foram usados dados experimentais de pressão e temperatura medidos na bancada experimental do motor no LABCET. A pressão na entrada foi medida em função do ângulo de manivela com um transdutor de pressão PX 309-030A5V marca Omega, localizado a 25 cm de distância da válvula de admissão e a temperatura do ar foi medida nesta mesma posição. Com os dados medidos experimentalmente, foi fornecida a pressão de admissão em função do ângulo de manivela no *Converge CFD* para a entrada de escoamento. As espécies na entrada correspondem aos componentes do ar, (Turns, 2000). Para a entrada do coletor de admissão do motor não foi usada como condição de contorno a pressão de estagnação devido a que no domínio computacional (Fig. 9) o ponto correspondente à entrada, não está em contacto direto com a atmosfera, já que este ponto encontra-se ainda num ponto médio no duto de admissão entre a entrada real do coletor e a válvula de admissão e neste ponto foi localizado o transdutor de pressão.

Na saída, as condições de temperatura e espécies são dadas pelas medições experimentais na exaustão do motor, feitas na bancada experimental e tomadas de (Garzón, 2012), e com pressão atmosférica medida no barómetro de LABTERMO (Laboratório de Ciências Térmicas) da UFSC.

3.3.4 Condições iniciais do modelo

A geometria do motor é dividida em três regiões principais: cilindro, duto de admissão e duto de exaustão.

No duto de admissão como condição inicial de temperatura foi considerada a temperatura média dos gases nesta região, obtida da simulação de transferência de calor (Apêndice A), a pressão como sendo a pressão atmosférica medida no barómetro de LABTERMO e as espécies correspondem às que formam o ar.

Para os gases no cilindro no estado inicial, a pressão usada foi medida experimentalmente no motor, a temperatura foi obtida de forma teórica com os dados experimentais de pressão num modelo zero-dimensional (Garzón, 2017), as espécies foram consideradas as mesmas medidas experimentalmente na exaustão, (Garzón, 2012).

Para o duto de exaustão, a temperatura inicial na região foi considerada como a temperatura média dos gases obtida na simulação de transferência de calor (Apêndice A), a pressão no duto como

a pressão atmosférica e as espécies são consideradas as medidas experimentalmente na exaustão, (Garzón, 2012).

3.3.5 Parâmetros de desempenho analisados

Os parâmetros de desempenho analisados para o motor são o coeficiente de descarga instantâneo C_{Di} (Equação (3.2)), eficiência volumétrica η_v (Equação (2.13)) e a razão de *swirl* e razão de *tumble* (Equação (3.3)).

3.4 RESULTADOS E ANÁLISE

Nesta secção são apresentados os resultados da simulação da admissão e da compressão no motor de combustão interna diesel. Os resultados são analisados para os diferentes processos e parâmetros presentes no motor, entre os quais se encontram a eficiência volumétrica, coeficiente de descarga, estrutura do escoamento, campo de pressão, de temperatura, de velocidade entre outros. As variáveis aqui relacionadas correspondem a valores médios nas diferentes regiões da geometria do motor.

Na análise são usados dados obtidos da simulação multidimensional denotados nas diferentes figuras como *MD*, dados experimentais denotados como *EXP* e dados zero-dimensionais denotados como *0D*.

3.4.1 Coeficiente de descarga na admissão C_D

Para o cálculo do coeficiente de descarga instantâneo C_{Di} é utilizada a Equação (3.2). Pela dificuldade de medir experimentalmente a vazão de massa de ar no motor, nesta equação a vazão de massa real de ar \dot{m} foi considerada como a obtida na simulação multidimensional e o cálculo de vazão de massa teórica foi feito usando um modelo zero-dimensional. O coeficiente de descarga instantâneo de admissão é mostrado na Fig. 13, onde os valores maiores de C_{Di} são obtidos para uma velocidade do motor de 2100 rpm. Para o motor a 1800 rpm o coeficiente de descarga global C_D é de 0,51 e para 2100 rpm o C_D é de 0,55. A vazão de massa na admissão obtida da simulação multidimensional em *Converge CFD* e a obtida de forma isentrópica com o modelo zero-dimensional pode se ver na Fig.14 para as duas velocidades. Nestas figuras é possível observar as diferenças entre os dois modelos de cálculo da vazão de massa, onde ao início da admissão antes que o pistão chegue ao PMS, ao

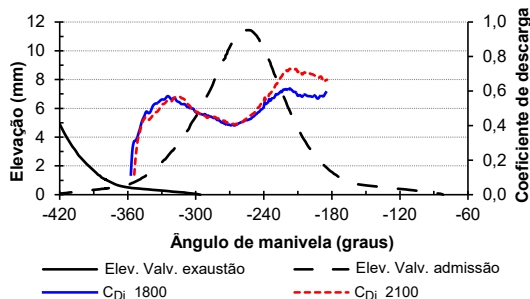


Figura 13 – Elevação das válvulas e coeficiente de descarga. (Fonte: Autor)

final da exaustão (-360°) a válvula de admissão está aberta e então há saída de produtos de combustão para o duto de admissão o qual é normal pela sobreposição de válvulas, (Pulkrabek, 1997), e isto é observado como uma vazão de massa negativa nas figuras. Esta vazão de massa negativa quando o pistão inicia o curso de admissão, pelos efeitos de inercia, continua até 3° depois do PMS para 1800 rpm e 6° depois do PMS para 2100 rpm. Quando o pistão chega até o PMI (-180°) a válvula de admissão ainda está aberta, e no início do curso de compressão quando o pistão começa a subir, o gás pela inercia continua entrando ao cilindro durante 30° depois do PMI para 1800 rpm e durante 35° depois de PMI para 2100 rpm. Pelo fato de que a válvula de admissão ainda está aberta, antes de seu fechamento sai gás do cilindro para o duto de admissão. A vazão de massa pela válvula de admissão aumenta com o aumento da elevação da válvula e com o aumento da diferença de pressão entre o coletor de admissão e o cilindro.

A massa residual no interior do cilindro é a massa mínima ao final do curso de exaustão e início da admissão aonde tem sobreposição de válvulas, e a massa máxima de gás no cilindro ocorre quando o cilindro está perto do PMI ao final do curso de admissão, mas depois de este ponto devido a que a válvula de admissão ainda não fechou, ocorre fluxo reverso do cilindro para o coletor de admissão ficando ao final uma massa no cilindro menor à massa máxima. Na Tabela 8 estão relacionadas as massas de gás no interior do cilindro, sendo que para o motor a 1800 rpm é obtida a maior percentagem de massa ($3,4\%$) que retorna ao coletor de admissão antes de que a válvula de admissão feche.

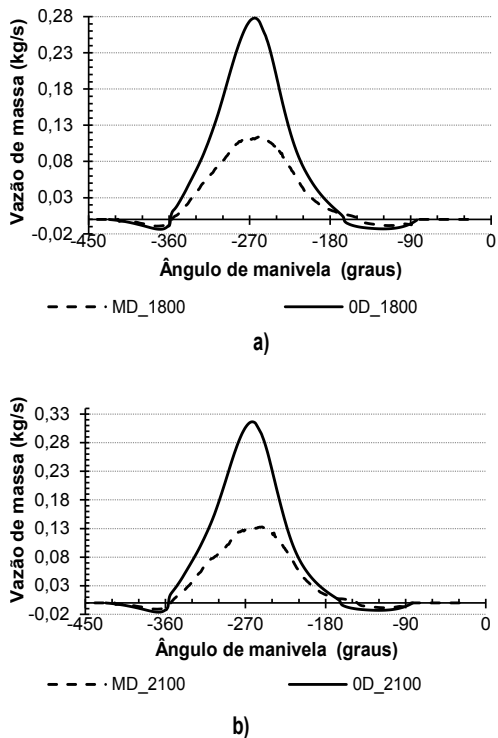


Figura 14 – Vazão de massa na admissão. a) 1800 rpm, b) 2100 rpm. (Fonte: Autor)

3.4.2 Eficiência volumétrica η_v

Em teoria a massa de ar que deveria entrar no cilindro do motor é igual ao produto da massa específica do ar nas condições de temperatura e pressão no exterior do motor, e o volume deslocado pelo pistão. Na realidade isto não ocorre pelo pouco tempo em cada ciclo, pelas restrições no duto de admissão, e então entra menos massa de ar no cilindro que a quantidade ideal. A eficiência volumétrica do motor está dada pela Equação (2.13), onde m_a é a massa total admitida por ciclo de acordo com a Tabela 8, e corresponde à massa final no cilindro menos a massa residual, e para o motor simulado a massa ideal de ar é $1,400\text{E-}3$ kg.

As eficiências volumétricas para as duas velocidades de rotação do motor são as mostradas na Tabela 8.

Tabela 8 – Massa de gás no cilindro e eficiência volumétrica por ciclo. (Fonte: Autor)

| Item | 1800 rpm | 2100 rpm |
|----------------------------------|----------|----------|
| Massa residual [kg] | 3,460E-5 | 3,322E-5 |
| Massa máxima [kg] | 1,128E-3 | 1,115E-3 |
| Massa de reverso [kg] | 3,737E-5 | 3,060E-5 |
| Massa total admitida [kg] | 1,093E-3 | 1,082E-3 |
| Massa final no cilindro [kg] | 1,091E-3 | 1,084E-3 |
| Percentagem massa de reverso [%] | 3,4 | 2,8 |
| Eficiência volumétrica η_v | 78,1 | 77,2 |

Estes valores de eficiência volumétrica, para a configuração do pistão do motor, estão de acordo com os valores obtidos por (Sushma & Jagadeesha, 2013) onde são feitas as simulações para três configurações de pistão, e obtida a eficiência volumétrica entre outros parâmetros do motor.

3.4.3 Estrutura do escoamento

Na análise da estrutura do escoamento no curso de admissão e de compressão, são usados os campos de velocidade, pressão, temperatura, energia cinética turbulenta e dissipação de energia cinética turbulenta.

No duto de admissão antes da válvula, é observado que a velocidade do escoamento no contorno da haste da válvula é maior e pela forma do duto de admissão nesta secção gera uma rotação do escoamento como pode se ver na Fig. 15a e 15b para elevação da válvula de 10 mm (aproximadamente no meio do curso de admissão) para as duas velocidades do motor. Na passagem pela válvula de admissão são geradas velocidades perto de 140 m/s devido à restrição, e é formado um jato anular cônico. O jato atinge a cabeça do pistão e as paredes do cilindro formando vórtices pela interação com estas superfícies, como pode se ver na Fig. 15c e 15d, para o início da admissão com 3 mm de elevação da válvula. Nestas figuras é possível ver que quando o motor está na velocidade de 2100 rpm, as velocidades do escoamento na admissão são maiores (linhas vermelhas), comparado com o motor a 1800 rpm.

A turbulência no cilindro é alta durante a admissão e diminui quando a vazão de massa é baixa perto do PMI. Na compressão, ela aumenta com o *swirl* e o *tumble*, perto do PMS. No interior do cilindro, o movimento de massa forma grandes vórtices, gerados

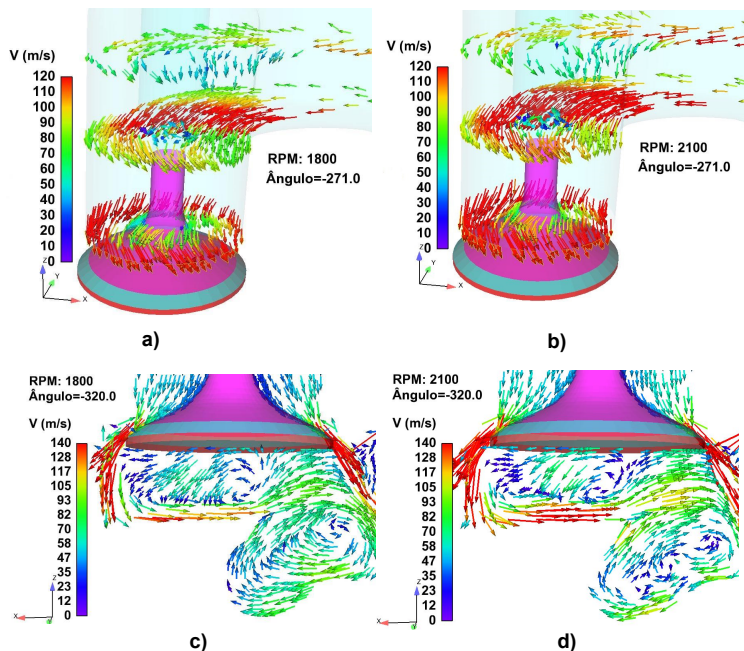


Figura 15 – Velocidade do escoamento na admissão. a) Haste da válvula 1800 rpm, b) Haste da válvula 2100 rpm, c) No cilindro 1800 rpm, d) No cilindro 2100 rpm. (Fonte: Autor)

principalmente pela geometria da admissão, a válvula e pela forma do pistão. Na seção central do cilindro no plano xz , é formado um vórtice maior devido à não se ter a válvula de admissão centralizada no cilindro, e os vórtices menores são gerados pelo primeiro vórtice, como pode se ver na Fig. 16a para a metade do curso de admissão. Na Fig. 16b na seção central do cilindro no plano yz observam-se dois vórtices maiores de recirculação oposta, sob a válvula devido à geometria da admissão (porto, válvula), e outros vórtices são gerados pelos maiores.

As oscilações que são produzidas no duto no curso de admissão, ainda permanecem quando a válvula fecha, e as ondas de pressão permanecem com efeitos negativos ou positivos para o seguinte processo de admissão. As amplitudes das oscilações de pressão dependem do comprimento do duto de admissão, diminuindo nos pontos mais longe da válvula, como pode se observar na Fig. 17

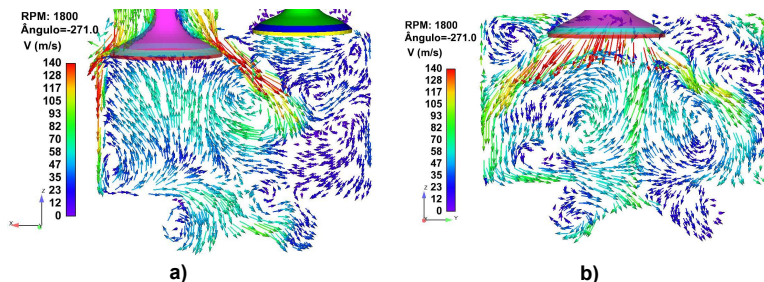


Figura 16 – Vetores de velocidade do escoamento no cilindro no ângulo de -271° . a) Plano xy, b) Plano yz. (Fonte: Autor)

para 1800 rpm, onde a linha vermelha representa o ponto mais longe da válvula e tem menores amplitudes na oscilação da pressão que a linha azul, a qual é de um ponto mais perto da válvula. Nesta figura o ponto 1 é o ponto mais longe da válvula e o ponto 3 é o mais perto dela.

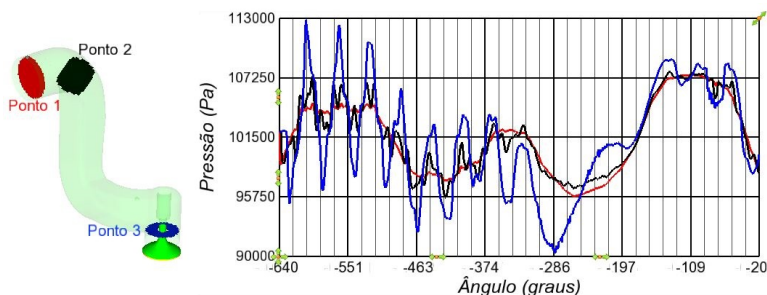


Figura 17 – Pressão no duto de admissão em função do ângulo de virabrequim. (Fonte: Autor)

A velocidade do escoamento na admissão depende da área de passagem pela válvula de admissão, da diferença de pressão entre o escoamento a montante e a jusante da válvula e da velocidade do pistão. A Fig. 18 mostra o valor da velocidade máxima do escoamento na passagem pela válvula para o motor a 1800 rpm, em função do ângulo de manivela com velocidade máxima de aproximadamente 280 m/s, correspondendo esta velocidade máxima à primeira metade do curso de admissão o qual também é descrito por (Heywood,

1988) .

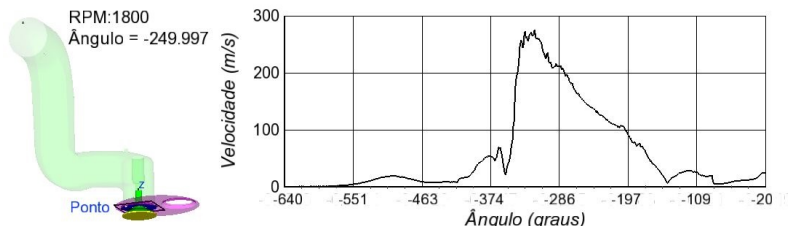


Figura 18 – Velocidade do escoamento na válvula de admissão em função do ângulo de manivela. (Fonte: Autor)

A geometria do pistão não influencia, significativamente, o escoamento no interior do cilindro no curso de admissão. Pela geometria do pistão (onde a câmara de combustão está perto da linha central do cilindro e na coroa do pistão) quando o pistão está perto do PMS, no curso de compressão, é reduzido o raio de rotação do escoamento até o raio da câmara de combustão. Considerando que o momento angular do fluido é conservado, os elementos de fluido que são deslocados para a parte interna do cilindro têm um aumento de velocidade angular o qual é desejável para espalhar a chama de combustão mais rapidamente.

3.4.4 *Swirl e Tumble*

O movimento rotacional do fluido em torno do eixo do cilindro (z) é chamado de *swirl*, o qual contribui a melhorar a mistura combustível-ar e a espalhar a chama na combustão. Este movimento não é uniforme dentro do cilindro, sendo maior longe da parede e menor perto à parede do cilindro devido ao arrasto viscoso. Para quantificar o movimento rotacional no cilindro é usada a razão de *swirl* (R_s).

A razão de *swirl* no início da admissão tem um valor negativo numa faixa de aproximadamente 80° depois do início, e é alta na segunda metade da admissão, diminuindo um pouco durante o início da compressão pelos efeitos de arrasto viscoso com as paredes, e aumenta de novo ao final da compressão em função da geometria da câmara de combustão, como pode se ver na Fig. 19. A mudança dos valores de *swirl* de negativos em -320° para valores positivos em -230° pode ser observado na sequência das Fig. 20a e 20b para 1800

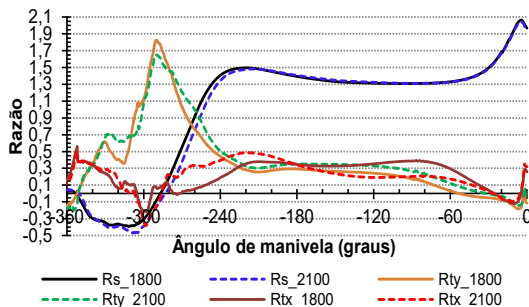


Figura 19 – Razão de *swirl* e razão de *tumble* em função do ângulo de manivela. (Fonte: Autor)

rpm, e Fig. 20c e 20d para 2100 rpm, onde os planos de visualização estão a 13 mm e a 75 mm de distância do cabeçote respectivamente. Na Fig. 20 pode se ver que ao início da admissão (-320°) a velocidade do ar no cilindro está em sentido anti-horário em varias zonas do cilindro como consequência da fase de exaustão, e no final da admissão (-230°) a velocidade no interior do cilindro está em sentido horário quase na totalidade do volume gerando um vórtice maior no centro e dois vórtices menores ao lado da válvula de admissão, gerados por o ar que vem da admissão. O vórtice maior tem um eixo de rotação que não coincide exatamente com o eixo do cilindro, o que é normal segundo (Heywood, 1988).

No motor diesel o *swirl* é usado para obter mistura rápida de combustível-ar devido a que quando o pistão na compressão está próximo ao PMS o *swirl* aumenta devido à forma do pistão (*bowl*), que funciona como câmara de combustão no centro do cilindro, onde é forçado o ar a entrar e por isto a razão de *swirl* aumenta, pois se é negligenciado o atrito, o momento angular é conservado e o momento de inercia do ar diminui, então a velocidade angular deve aumentar.

O movimento de rotação do escoamento no eixo x é dado pela razão de *tumble* em x (R_{tx}). A R_{tx} aumenta pouco ao início da admissão e diminui rapidamente numa faixa de 60° , Fig. 19. Na metade do curso de admissão o jato anular de escoamento na admissão gerado pela válvula, forma dois vórtices maiores de rotação oposta nos lados do cilindro e vórtices menores nos cantos superiores e na câmara de combustão como pode se ver na Fig. 16b.

A razão de *tumble* em y (R_{ty}), quantifica o movimento de rota-

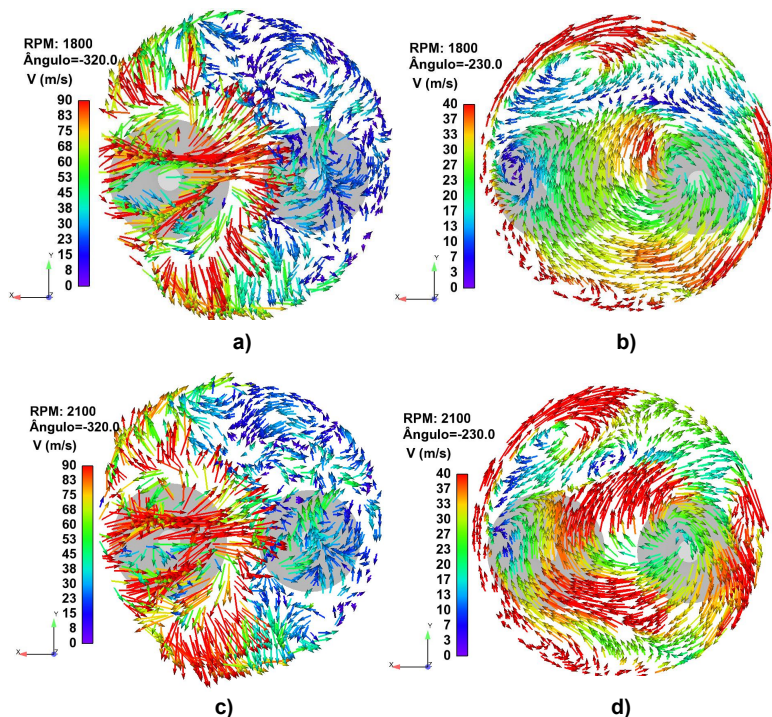


Figura 20 – Vetores de velocidade no cilindro em torno do eixo z em planos a 13 mm e 75 mm do cabeçote. a) e b) em 1800 rpm, c) e d) em 2100 rpm (Fonte: Autor)

ção do escoamento no eixo y do cilindro. R_{ty} aumenta rapidamente ao início da admissão até valores máximos em aproximadamente 70° depois do início da admissão, em seguida diminui de novo rapidamente, Fig. 19, mantendo-se constante até a primeira metade do curso de compressão. Na Fig. 16a, para a metade do curso de admissão, na válvula de admissão é gerado um jato anular o qual produz no centro do cilindro, um vórtice maior no sentido horário no plano xz , e este vórtice produz vários vórtices secundários.

O máximo valor de *swirl* na admissão é obtido 40° antes do PMI, depois de que o pistão obtém a máxima velocidade (a qual ocorre perto da metade do curso). Na compressão perto do PMS (-20°), na câmara de combustão para o plano yz são formados dois vórtices opostos como pode se ver na Fig. 21a, o qual concorda

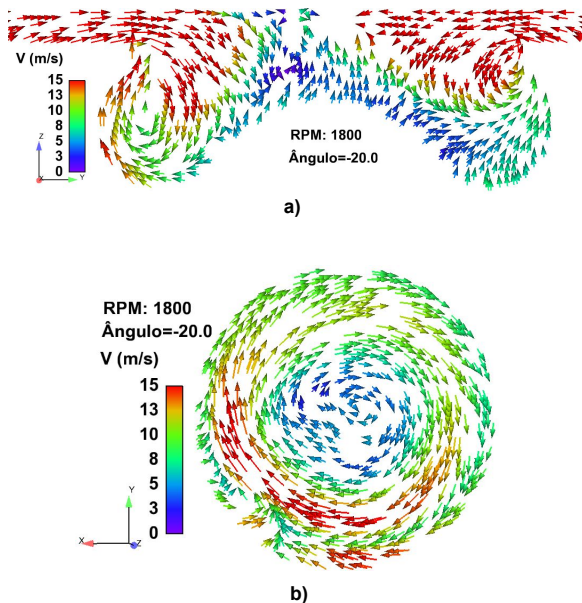


Figura 21 – Vetores de velocidade na compressão, 20° antes do PMS. a) Plano yz , b) Plano xy (Fonte: Autor)

com a modelagem feita por (Payri *et al.*, 2004) e com o descrito em (Heywood, 1988). Também é possível ver que neste ângulo da compressão de acordo com a Fig. 21b, é gerada uma alta rotação do escoamento no eixo z para um plano a 13,5 mm de distância do cabeçote, ao interior da câmara de combustão, concordando com o alto valor de *swirl* da Fig. 19, e neste ponto o aumento de *swirl* é devido a que, pela forma da coroa do pistão o ar é forçado a entrar no interior da taça e a velocidade angular do ar aumenta.

No final da compressão o momento angular diminui, e as perdas de momento angular variam dependendo da geometria da câmara de combustão, padrão inicial de *swirl* e velocidade do motor, devido a que elas são dependentes do atrito com a parede, dissipação turbulenta e gradiente de velocidade.

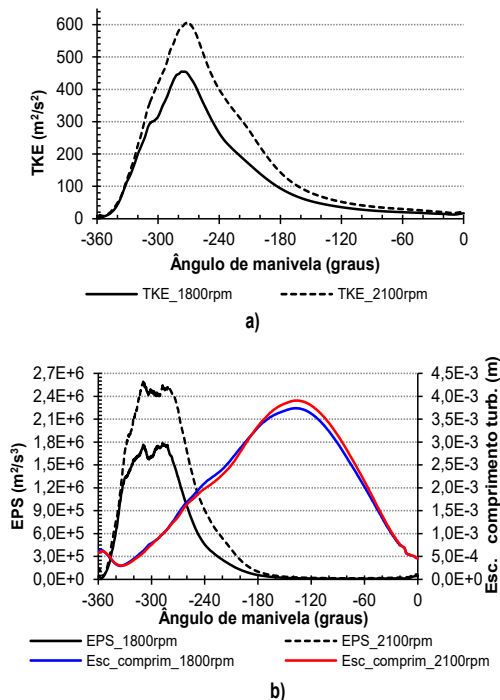


Figura 22 – a) TKE média, b) ESP média no cilindro em função do ângulo de manivela. (Fonte: Autor)

3.4.5 Energia cinética turbulenta (k) e dissipação de energia cinética turbulenta (ε)

A energia cinética turbulenta média no interior do cilindro durante o início da admissão é pequena e atinge um valor máximo em aproximadamente -270° , como pode se ver na Fig. 22a, e depois deste ponto diminui voltando para valores perto de zero ao final da compressão. A formação e destruição de k estão ligadas à taxa de dissipação de energia cinética turbulenta e, na figura, pode se observar que a k é grande onde ε é grande. A dissipação turbulenta depende da escala de comprimento das estruturas turbulentas (vórtices) e com o incremento da escala de comprimento das estruturas turbulentas ε diminui rápido. A escala de comprimento das estruturas turbulentas tem um incremento grande na admissão (na fase de maior enchimento do cilindro) e onde o *swirl* tem o maior incre-

mento. Os valores médios de energia cinética turbulenta e taxa de dissipação de energia cinética turbulenta no momento da injeção de combustível para o motor em 1800 rpm são $13,6 \text{ m}^2/\text{s}^2$ e $11453,7 \text{ m}^2/\text{s}^3$ e para o motor em 2100 rpm são $118,2 \text{ m}^2/\text{s}^2$ e $18256,0 \text{ m}^2/\text{s}^3$.

As maiores flutuações de velocidade no cilindro estão onde é obtida a maior k , neste caso na metade do curso de admissão, o que coincide com os resultados obtidos por (Payri *et al.*, 2004), onde é concluído que nos cursos de admissão e compressão k não depende da forma do pistão.

3.4.6 Pressão e temperatura

No curso de admissão, no interior do cilindro é gerada uma zona de baixa pressão, quando comparada com a pressão no duto de admissão. As maiores variações de pressão são geradas na sede da válvula onde são obtidas as maiores velocidades do escoamento.

No ângulo de manivela de -271° , quando a elevação da válvula de admissão é de aproximadamente 10 mm, as zonas de menores pressões no interior do cilindro são mostradas na Fig. 23. Estas zonas de menor pressão estão onde são gerados vórtices no escoamento, o qual pode ser conferido ao comparar com a figura de vetores de velocidade no mesmo plano xz , Fig. 16a, onde o maior vórtice está perto do centro do cilindro, e portanto a menor pressão é nessa região. Na Fig. 23b pode se observar que a pressão no cilindro para o motor em 2100 rpm é menor que a pressão para o motor em 1800 rpm.

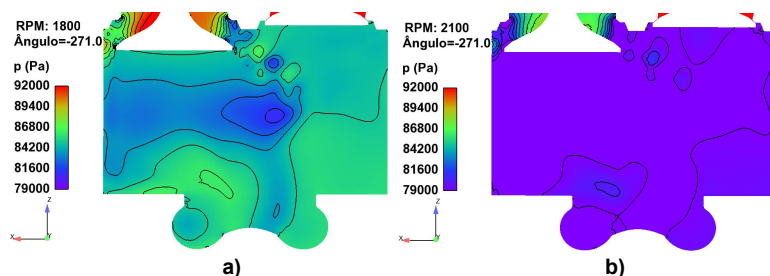
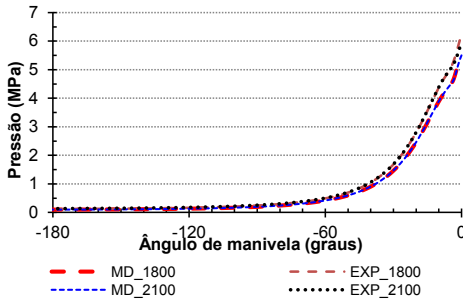


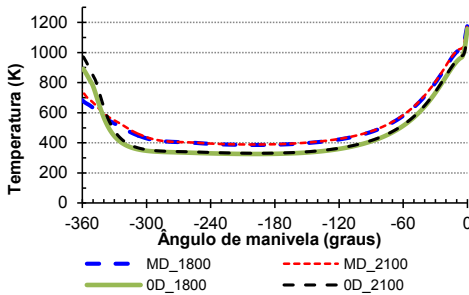
Figura 23 – Contornos de pressão no cilindro em -271° . a) 1800 rpm, b) 2100 rpm. (Fonte: Autor)

A pressão atinge um valor máximo no PMS ao final da compressão, como visto na Fig. 24a, mantendo uma pressão mínima

no curso de admissão e aumentando de forma rápida depois da primeira metade do curso de compressão. Nesta figura, é possível ver que as pressões medidas experimentalmente por (Garzón, 2017) no motor no final da compressão são maiores que as pressões obtidas na simulação multidimensional em *Converge CFD*. A temperatura e a pressão médias no momento da injeção para o motor em 1800 rpm são 961 K e 3,15 Mpa e para o motor em 2100 rpm são 969 K e 3,16 Mpa.



a)



b)

Figura 24 – a) Pressão média no cilindro, b) Temperatura média no cilindro em função do ângulo de manivela. (Fonte: Autor)

O campo de temperatura no cilindro, no curso de admissão com elevação da válvula de admissão de aproximadamente 10 mm, é mostrado na Fig. 25a e 25b, onde as menores temperaturas estão no coletor de admissão para o ar em condições ambiente, e as maiores temperaturas estão no lado da válvula de exaustão onde se tem gás residual quente no interior do cilindro. Com a admissão de

ar e a expansão no interior do cilindro, a temperatura diminui, e pela recirculação no interior do cilindro o gradiente de temperatura vai diminuindo. Na Fig. 24b pode se ver a temperatura no cilindro

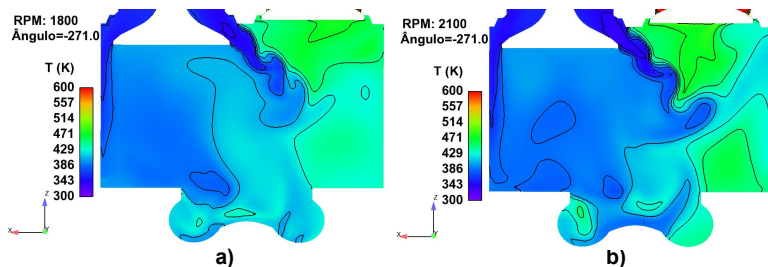


Figura 25 – Contornos de temperatura no cilindro em -271° . a) 1800 rpm, b) 2100 rpm (Fonte: Autor)

calculada com o modelo 0-dimensional e a temperatura obtida na simulação multidimensional em *Converge CFD*. No motor não foram feitas medições de temperatura pela complexidade do procedimento e falta de instrumentação adequada. Nesta figura, depois do início da combustão é possível ver que a inclinação da linha muda para aumentar mais rápido a temperatura.

3.5 CONCLUSÕES

Foi realizada a simulação numérica do escoamento de ar nos processos de admissão e compressão no motor, usando o modelo de turbulência $k - \varepsilon RNG$, considerando a geometria real do motor.

A simulação de admissão e compressão no motor diesel de injeção direta mostra que os campos de escoamento gerados no cilindro são consistentes quando comparados com os dados experimentais de pressão de outros estudos feitos, o qual fornece um conhecimento do comportamento do escoamento no motor.

A configuração do pistão do motor simulado, contribui a aumentar o *swirl* no final da compressão o que melhora a formação de mistura combustível-ar. Este aumento no *swirl* quando o pistão está perto do PMS na compressão (ver Tabela 9) é obtido com a geometria do pistão, câmara de combustão na coroa do pistão no centro do cilindro com entradas pronunciadas no pistão. Os valores

médios dos parâmetros importantes no cilindro são relacionados na Tabela 9.

A simulação correta do escoamento de ar nos cursos de admissão e compressão no motor garante que a nova fase da simulação que corresponde a spray de combustível e combustão no motor sejam consistentes, já que os resultados aqui obtidos são importantes no desenvolvimento de spray e da combustão as quais serão abordadas nas seguintes secções.

Tabela 9 – Resumo de resultados obtidos de razão de *swirl*, razão de *tumble*, energia cinética turbulenta, taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, pressão e temperatura. (Fonte: Autor)

| Item | 1800 rpm | 2100 rpm |
|--|----------|----------|
| Máxima razão de <i>swirl</i> | 2,04 | 2,06 |
| Ângulo de máxima razão de <i>swirl</i> [°] | -5 | -5 |
| Máxima razão de <i>tumble</i> | 1,65 | 1,82 |
| Ângulo de máxima razão de <i>tumble</i> [°] | -290 | -290 |
| Razão de <i>swirl</i> no ângulo de início da injeção | 1,79 | 1,80 |
| Razão de <i>tumble</i> no ângulo de início da injeção | -0,07 | -0,09 |
| Energia cinética turbulenta no ângulo de início da injeção [m ² /s ²] | 13,3 | 18,2 |
| Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta no ângulo de início da injeção [m ² /s ³] | 11453,7 | 18256,0 |
| Pressão no ângulo de início da injeção [MPa] | 3,15 | 3,16 |
| Temperatura no ângulo de início da injeção [K] | 961 | 969 |

Capítulo 4

ANÁLISE DE SPRAY E DA ATOMIZAÇÃO

O combustível em um motor a combustão interna de ignição por compressão é injetado no cilindro do motor usando um injetor de alta pressão, pois é necessário que o jato de combustível entre na câmara de combustão em alta velocidade para atomizar o combustível em pequenas gotas facilitando a evaporação e a mistura com o ar admitido. A outra finalidade da injeção em alta pressão é garantir o fornecimento, no menor tempo possível, da quantidade mínima necessária de combustível para a utilização do ar admitido no cilindro.

4.1 INTRODUÇÃO

O uso de óleo vegetal puro (SVO) como combustível, tem-se tornado de interesse nos anos recentes para uso em motores diesel ou em queimadores pela potencial contribuição para a segurança energética devido à diminuição das reservas do petróleo e ao aumento do valor de combustíveis fósseis, e devido a que os SVOs são renováveis. Contudo, no uso do SVO como combustível, deve-se assegurar uma apropriada atomização, evaporação e combustão já que para este óleo são encontradas características bastante diferentes das do óleo diesel na ignição e com depósito de coque nas partes mais frias da câmara de combustão devido à decomposição térmica e polimerização sob determinadas condições de temperatura.

São poucos os estudos de evaporação de óleos vegetais puros reportados na literatura, e na maioria têm sido feitas pesquisas experimentais, descrevendo o mecanismo de evaporação e determinação das características de evaporação, mas não têm sido propostos modelos para calcular seus parâmetros característicos.

Para os óleos vegetais na fase transiente de aquecimento, a expansão da gota é seguida de uma baixa evaporação e, além disso, durante esta fase de baixa evaporação podem ocorrer reações químicas (decomposição, polimerização), devido às características químicas deles, já que os triglicéridos que compõem o óleo podem-se

decompor antes da evaporação se a temperatura for suficientemente alta.

Têm sido feitos estudos das características e uso de SVOs e de gorduras animais em motores diesel, e muitos destes estudos mostram que seu comportamento é muito próximo ao óleo diesel, além disso são renováveis e não contêm enxofre. A combustão de spray de combustível líquido a altas temperaturas e altas pressões na câmara de combustão de motores diesel é um problema de grande interesse, já que tais condições podem levar à vaporização de gota e combustão super críticas. É normal que em um motor diesel a temperatura e a pressão na câmara de combustão sejam maiores que a temperatura e a pressão críticas, pelo menos duas vezes.

Nos motores diesel a formação de gotas, quebra de gotas e vaporização são processos importantes que afetam a taxa de combustão e o atraso entre o início da injeção e o início da combustão. A distribuição e concentração de vapor de combustível na câmara de combustão afeta diretamente a eficiência, desempenho e as emissões do sistema de combustão. Se as características da vaporização e combustão do spray de combustível fossem conhecidas em detalhe, o projeto do sistema de injeção e câmara de combustão pode ser otimizado sem a necessidade de experimentos que são geralmente caros. Em spray diesel a atmosfera oxidante está a alta pressão e alta temperatura e neste ambiente o aquecimento inicial das gotas frias ao longo de seu tempo de vida pode alcançar sua temperatura crítica.

O spray e combustão num motor são processos complexos, e compreendem uma grande faixa de escalas temporais e espaciais no interior do cilindro (desde escalas químicas até escalas de Kolmogorov). A dinâmica de fluidos computacional (CFD) é uma ferramenta importante para entender as características do spray de combustível. A simulação da evaporação de spray é útil para obter informação da temperatura e composição no interior do cilindro, para entender a fenomenologia da reação do spray com o objetivo de melhorar a eficiência da combustão e a emissão de poluentes.

Os biocombustíveis têm características diferentes dos combustíveis minerais, e esta é a maior justificativa para analisar a atomização de SVO versus o óleo diesel. A atomização de SVOs demanda um tempo maior devido às forças intra moleculares. A alta penetração de spray de SVO, aumenta a possibilidade do spray de atingir a parede do cilindro, e então lavar assim o óleo lubrificante presente na superfície aumentando o desgaste gerado pelos anéis na parede

do cilindro. A composição do óleo vegetal varia de um tipo para outro, e os valores de viscosidade são altos quando comparados com o diesel, igualmente a tensão superficial, afetando a atomização do combustível, a vaporização de gota e a mistura combustível-ar. A diferença na atomização do spray e características de formação de mistura combustível-ar, é um motivo importante para pesquisar sobre as relações entre as propriedades físicas e as características de spray.

Os estudos de comportamento do spray são classificados em macroscópicos (onde é estudada a penetração e o ângulo de spray) e microscópicos, onde são observados parâmetros como velocidade da gota, diâmetro de gota e distribuição do tamanho de gota.

A simulação da evaporação e combustão em motores diesel usando n-dodecano ($C_{12}H_{26}$), é conveniente levando em conta que o n-dodecano tem características similares ao óleo diesel, de acordo com (Gong *et al.*, 2014) e (Som *et al.*, 2011). Normalmente, o combustível diesel tem sido representado pelo n-heptano como substituto de combustível, mas levando em conta a média de átomos de carbono contidos no diesel (na faixa de 12 a 13 carbonos), o n-dodecano tem sido usado como substituto de combustível diesel recentemente por diferentes pesquisadores. Também é importante dizer que a utilização de n-dodecano como substituto do diesel, fez com que o laboratório SANDIA tenha-se dedicado a fornecer medições experimentais das características de spray e combustão de n-dodecano em diferentes configurações de volume e de condições termodinâmicas. Devido às características de ponto de ebulição do n-dodecano similares ao óleo diesel, então simula melhor o processo de mistura combustível-ar. Na validação de (Som *et al.*, 2011), é concluído que o n-dodecano é adequado para a simulação multidimensional de spray e combustão com combustível diesel.

Nos motores diesel é importante manter as emissões de NOx e fuligem em níveis dentro das regulamentações. A distribuição temporal e espacial do combustível injetado na câmara de combustão é um fator determinante na estimativa de índices de emissões e desta forma a simulação numérica é uma ferramenta importante na otimização da formação da mistura e posterior queima. Observa-se aqui o potencial do uso de simulações em CFD na pesquisa de novos e melhorados conceitos na combustão e formação de mistura, o qual pode ser atingido a partir de pesquisas numéricas e experimentais. A correta modelagem do processo de atomização tem um papel importante na capacidade de prever a totalidade do processo de

combustão diesel.

No estudo feito aqui, a descrição do spray (fase discreta ou dispersa) é feita pelo método Lagrangiano, e a fase gasosa é descrita usando implementação Euleriana, e o transporte de fase dispersa é calculado pela trajetória de um dado número de parcelas representativas. A parcela é um número de gotas onde todas as gotas têm as mesmas propriedades físicas e também se movimentam, quebram e evaporam igualmente. A simulação em *Converge CFD* permite manipular um grande número de espécies e reações químicas de acordo ao mecanismo cinético usado, e também permite o uso das ferramentas *fixed embedding* e *AMR* para melhorar o refino de malha em pontos críticos do domínio, enquanto que os pontos de pouco interesse podem não ter refino, com o objetivo de diminuir o tempo de simulação.

4.1.1 Estrutura do spray em motores

A estrutura do spray de combustível em motores é identificada pelos parâmetros de dispersão do spray, penetração de spray e ângulo de cone. Em spray de alta pressão em motores diesel, a distribuição de tamanho de gota depende dos parâmetros de injeção e das propriedades do ar e do combustível.

O grau de dispersão é definido como a razão entre o volume do spray e o volume do líquido dentro do spray. Uma boa dispersão tem como vantagem que o líquido é misturado rapidamente com o gás circundante e a taxa de evaporação é alta. Com injetores de orifícios lisos de ângulo de spray estreito, a dispersão é pequena, e com injetores de redemoinho a dispersão é controlada, na maioria, por outras características do spray tais como o ângulo de cone, tamanho médio da gota, distribuição do tamanho da gota, e em menor quantidade pelas propriedades físicas do líquido e o ambiente circundante.

A distribuição de tamanho da gota no spray de combustível depende dos parâmetros de injeção e das propriedades do combustível e o ar. As medidas das características da gota em um motor diesel em operação é muito difícil, então são obtidos resultados de estudos de injeção em câmaras a volume constante com ar a alta pressão no ambiente quiescente e determinadas temperaturas. A distribuição do tamanho de gota numa localização dada pode mudar com o tempo durante o período de injeção. Adicionalmente como os detalhes do processo de atomização são diferentes na superfície e no núcleo do spray, e as trajetórias das gotas individuais dependem de

seu tamanho, velocidade e localização dentro do spray, desta forma a distribuição do tamanho de gota variará com a posição dentro do spray. Para caracterizar o spray, uma medida normalmente usada é o diâmetro médio sauter (SMD), o qual é o diâmetro da gota que tem a mesma razão superfície/volume que o do total do spray. Uma expressão empírica de SMD (em metros) para motores diesel é dada por Hiroyasu, (Baumgarten, 2006), como

$$\frac{SMD}{D} = 0,38Re^{0,25}We_l^{-0,32} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g} \right)^{0,37} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{-0,47}. \quad (4.1)$$

onde, ρ_g é massa específica do gás, ρ_l é massa específica do líquido, μ_l é viscosidade dinâmica do líquido, μ_g é a viscosidade dinâmica do gás, We_l é número de Weber do líquido.

A penetração do spray é a máxima distância que o spray atinge quando é injetado no ar em repouso. A penetração depende de duas forças opostas as quais são a energia cinética inicial do jato e a resistência aerodinâmica do gás circundante. No jato inicial a energia cinética é alta, mas como a forma e a área da superfície do spray aumentam, a energia cinética do líquido diminui, pela ação do atrito com o gás circundante. Quando a gota não tem energia cinética seu movimento é determinado pela ação da gravidade e pelo movimento do gás circundante. Uma alta penetração de spray em um motor diesel produz choque de combustível líquido em superfícies frias, especialmente com pouco o nulo *swirl*, baixas taxas de mistura, e isto aumenta as emissões de hidrocarbonetos não queimados. Uma baixa penetração resulta em um pobre uso do ar devido a que o ar na periferia da câmara não entra em contato com o combustível. Há correlações experimentais para a penetração do spray de combustível através da câmara de combustão para ar em repouso em função do tempo, e uma de elas é, (Heywood, 1988; Lefebvre, 1989)

$$S = 3,07 \left(\frac{\Delta p}{\rho_g} \right)^{1/4} (tD)^{1/2} \left(\frac{294}{T_g} \right)^{1/4}, \quad (4.2)$$

onde Δp é a queda de pressão através do injetor, t é o tempo depois de iniciar a injeção, ρ_g é a massa específica do gás, D diâmetro do furo. É recomendável usar a Equação (4.2) em condições de baixa e alta carga, exceto quando a pressão na câmara de combustão é grande ($>10\text{MPa}$). Hiroyasu e (Heywood, 1988), fizeram uma relação entre a penetração do spray com *swirl* (S_s) e a penetração do

spray sem *swirl* (S) dada pela seguinte equação

$$\frac{S_s}{S} = \left(1 + \frac{\pi R_s N S}{30 v_j} \right)^{-1}, \quad (4.3)$$

onde R_s é a razão de *swirl*, v_j velocidade inicial do jato de combustível e N é a velocidade do motor.

O ângulo de cone do spray é influenciado pelas medidas do furo do injetor, as propriedades do fluido e a massa específica do gás circundante onde o spray é descarregado. Para jatos em regime de atomização o ângulo de spray pode ser estimado com a seguinte equação, (Lefebvre, 1989)

$$\tan \frac{\theta}{2} = \frac{1}{A} 4\pi \left(\frac{\rho_g}{\rho_l} \right)^{1/2} \frac{\sqrt{3}}{6}, \quad (4.4)$$

onde A é a constante da geometria do injetor, função de l_o/d_o , e deve ser obtida experimentalmente, d_o é o diâmetro do orifício de descarga, l_o é o comprimento do orifício. Assumindo um escoamento padrão de vórtices dentro do injetor da forma $vr_n = cte$, é obtida a seguinte equação empírica para o semiângulo inicial do cone de spray, (Lefebvre, 1989),

$$\tan \frac{\theta}{2} = \frac{(\pi/4)(1-X)K_\theta}{B}, \quad (4.5)$$

$$B = \frac{A_p}{D_m d_o} \left(\frac{D_m}{d_o} \right)^{1-n}, \quad (4.6)$$

onde as constantes K_θ e n , são obtidas da seguinte forma

$$\Delta p > 2,76 MPa \begin{cases} K_\theta = 0,00812 \frac{A_p^{0,034048}}{A_o^{0,17548} A_s^{0,24579}} \\ n = 17,57 \frac{A_o^{0,1396} A_p^{0,2336}}{A_s^{0,1775}} \end{cases}$$

$$\Delta p < 2,76 MPa \begin{cases} K_\theta = 0,0831 \frac{A_p^{0,34873}}{A_o^{0,26326} A_s^{0,32742}} \\ n = 28 \frac{A_o^{0,14176} A_p^{0,27033}}{A_s^{0,17634}} \end{cases}$$

onde X é a razão entre a área do núcleo do ar (A_a) e a área do orifício de descarga do injetor (A_o) $X = A_a/A_o$, A_p é a área total de entrada, A_s é a área de turbulência (*swirl*) da câmara, D_m é o diâmetro máximo da gota.

4.1.2 Objetivos do capítulo

O objetivo principal deste capítulo é fazer a simulação da atomização de combustível e formação de mistura na câmara de combustão de um motor diesel usando (a) óleo diesel e (b) uma mistura de óleo de soja-diesel com 80% de óleo de soja e 20% de diesel (80s20d).

Analisar a fenomenologia dos processos de injeção (spray) e evaporação de combustível em motores de ignição por compressão.

Para o processo de simulação, o software precisa das propriedades termofísicas dos combustíveis líquidos a serem usados na simulação. Algumas destas propriedades foram determinadas em função da temperatura de forma experimental em amostras de combustível usado no motor, outras usando bases de dados existentes e algumas outras obtidas da literatura.

4.1.3 Organização do capítulo

Neste capítulo correspondente ao spray de combustível, é feita uma revisão da modelagem de spray e de evaporação em motores de combustão interna, onde são descritos os diferentes modelos reportados na literatura, descrevendo principalmente os modelos que serão usados na simulação.

Após uma revisão bibliográfica extensa, foram bem poucas as publicações encontradas no tema de spray e evaporação de óleo vegetal. Estas poucas referências foram usadas como referências principais na realização deste trabalho, junto com a bibliografia encontrada para óleo diesel.

É feita uma descrição teórica do processo de atomização de spray com a relação dos regimes de atomização e fases de quebra de gota com evaporação, fazendo ênfase nos modelos de quebra primária, quebra secundária e evaporação que foram usados na simulação. Além disso, é feita uma descrição teórica da interação de fase dispersa com a fase contínua, denominada como interação turbulenta, relevante em motores de combustão interna.

A metodologia de solução no software *Converge CFD* é descrita como passo seguinte, relacionando a geometria usada e as características do modelo numérico, condições de contorno e condições iniciais.

No final do capítulo estão descritos os resultados obtidos na simulação, onde são analisados parâmetros tais como penetração de

spray, diâmetro da gota, massa de combustível evaporada, forma do spray, razão de equivalência e velocidade do spray.

4.2 REVISÃO DA LITERATURA DE SPRAY, ATOMIZAÇÃO E DE EVAPORAÇÃO

No momento da injeção de combustível, a coluna de líquido que deixa o injetor desintegra-se no cilindro em gotas de diferentes tamanhos. Este processo de desintegração acontece ao longo do eixo do jato e a sua extensão recebe o nome de comprimento de quebra. Ao continuar com a injeção, a massa de ar dentro do spray é maior e o spray diverge já que com o incremento de ar, a velocidade diminui. As gotas de combustível fora do eixo de spray são as primeiras a vaporizar, gerando uma mistura de vapor de combustível-ar, e a razão de equivalência é alta na linha do centro, diminuindo até zero no limite do spray onde há ar não misturado. O spray entra na câmara de combustão e interage com a parede sólida sendo forçado a mover-se de forma tangencial à parede. Em muitas aplicações o spray apresenta forma de cone oco de ângulo grande com as gotas concentradas na periferia, (Lefebvre, 1989).

4.2.1 Regimes de quebra de jatos líquidos

A fim de dar uma descrição quantitativa do processo de quebra do jato, Ohnesorge(1931) realizou medições em comprimentos de jatos e mostrou que o processo pode ser descrito pelo número de Weber do líquido (We_l) e o número de Reynolds (Re), (Baumgarten, 2006). O We_l é a razão entre as forças aerodinâmicas ($u^2\rho_l$) e as forças de tensão superficial (σ/D)

$$We_l = \frac{u^2 D \rho_l}{\sigma}, \quad (4.7)$$

$$Re = \frac{u D \rho_l}{\mu_l}, \quad (4.8)$$

onde u é a velocidade do jato, D é o diâmetro do furo do injetor, ρ_l é a massa específica do líquido, σ é a tensão superficial e μ é a viscosidade dinâmica. Com o número de Reynolds e o número de Weber do líquido obtém-se o número adimensional de Ohnesorge (Oh), o qual é a razão entre as forças internas de viscosidade e as forças de tensão superficial na interface, também chamado de

número de estabilidade, calculado como

$$Oh = \frac{\sqrt{We_l}}{Re} = \frac{\mu_l}{\sqrt{\sigma \rho_l D}}. \quad (4.9)$$

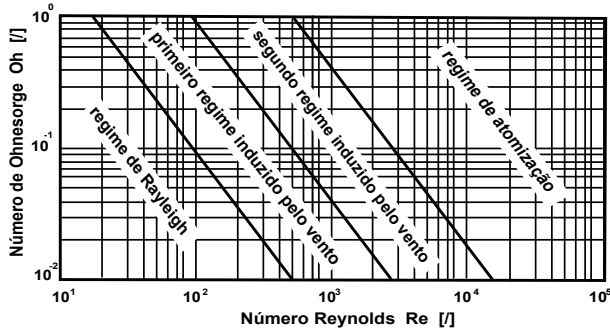


Figura 26 – Classificação do modo de desintegração. (Adaptado de (Baumgarten, 2006))

Na Fig. 26 é apresentado o diagrama de classificação do modo de desintegração com os regimes de quebra de jatos líquidos, e na Fig. 27 são apresentadas as formas dos jatos para os regimes de quebra.



Figura 27 – Forma dos jatos para cada regime de quebra. (Adaptado de (Baumgarten, 2006))

O regime de quebra de Rayleigh é aquele em que a quebra se deve ao crescimento não estável de ondas na superfície, iniciado pela tensão superficial e dá como resultado gotas maiores que o diâmetro do furo do injetor. Rayleigh (1878) compara a energia da superfície da configuração perturbada com a coluna não perturbada,

para chegar à conclusão de que o rompimento do jato é um problema dinâmico e a taxa de colapso é importante. Rayleigh mostrou que a taxa de crescimento da perturbação é exponencial e é dada pela seguinte expressão, (Baumgarten, 2006)

$$q_{max} = 0,97 \left(\frac{\sigma}{\rho_l d^3} \right)^{0,5}, \quad (4.10)$$

onde d é o diâmetro do jato. O comprimento ótimo da onda de perturbação é

$$\lambda_{otimo} = 4,51d. \quad (4.11)$$

Após a quebra, o cilindro de líquido resultante se torna uma gota esférica de diâmetro

$$D = 1,89d. \quad (4.12)$$

O primeiro regime de quebra induzido pelo vento é onde a força de tensão superficial do ar circundante produz gotas do tamanho do diâmetro do furo. O jato oscila sobre seu eixo tendo uma aparência sinuosa. Na formação das gotas com a influência do gás circundante, na medida em que a velocidade do jato aumenta, as forças aerodinâmicas do gás circundante não são desprezíveis e tendem a acentuar as ondas formadas sob o regime de Rayleigh.

O segundo regime de quebra induzido pelo vento é aquele em que o crescimento não estável da onda de comprimento curto, induzido pelo movimento relativo entre o líquido e o ar circundante, produz gotas de tamanho médio menor que o diâmetro do furo. O regime é associado como o aumento da efetividade das forças aerodinâmicas e a diminuição da influência das forças de tensão superficial.

O regime de atomização caracteriza-se pelo rompimento da superfície externa do jato no plano, ou antes, do plano de saída do injetor e o resultado são gotas de diâmetro muito menor que o diâmetro do furo do injetor. Este é o regime de atomização relevante para spray em motores, e a descrição teórica é muito mais complexa que para os demais regimes devido a que a desintegração depende das condições no interior do injetor as quais são desconhecidas e de natureza caótica. De acordo com (Lefebvre, 1989), o fator mais importante no processo de desintegração do jato é o efeito do movimento relativo entre a camada de saída do jato e o gás circundante; combinado com o atrito do gás, isto causa irregularidades na superfície suave do líquido e a produção de ligações não estáveis. Como a

velocidade relativa do gás aumenta, o tamanho das ligações diminui e o tempo de vida da gota torna-se curto. No colapso muitas gotas pequenas são formadas de acordo com a teoria de Rayleigh. De uma forma geral, o processo de atomização começa a ocorrer a partir de números de Weber acima de 40 e números de Ohnesorge acima de 10^{-2} .

4.2.2 Características da turbulência

Nos escoamentos turbulentos existem escalas de comprimento que caracterizam diferentes aspectos do comportamento do escoamento como descrito na seção 3.2.1. Os maiores vórtices no escoamento são limitados em tamanho pelos limites físicos do sistema e as escalas pequenas do movimento turbulento são limitadas pela difusão molecular. Os vórtices grandes na entrada do jato cônico do escoamento são os que produzem a maior parte da turbulência. Em tamanho, estes vórtices são da mesma ordem à espessura local do jato. Esta escala é chamada escala integral ℓ_o e é uma medida da estrutura de maior escala do campo do escoamento. O comprimento da escala integral é definido então como a integral do coeficiente de auto correlação da variação da velocidade entre dois pontos adjacentes no escoamento em relação à distancia variável entre os pontos, expressada da seguinte forma (Stiesch, 2003)

$$\ell_o = \int_o^\infty R_x dx, \quad (4.13)$$

onde R_x é a auto correlação espacial da velocidade. A escala integral do tempo de turbulência, (τ_I), é definida como a correlação entre duas velocidades num ponto fixo no espaço, mas separado no tempo, obtida como

$$\tau_I = \int_o^\infty R_t dt, \quad (4.14)$$

onde R_t é auto correlação no tempo da velocidade.

As pequenas estruturas têm resposta mais rápida às mudanças do padrão local do escoamento e são mais propensas a ser isotrópicas do que são os grandes vórtices. Nestas pequenas escalas de movimento turbulento (Escala de Kolmogorov), a viscosidade molecular atua para dissipar energia cinética em forma de calor.

Como descrito na seção 3.1.1, o *swirl* é a rotação organizada da carga ao redor do eixo do cilindro, e no motor diesel o *swirl* é usado para promover mistura mais rápida entre o ar circundante e o combustível injetado.

Durante a combustão, o curso de expansão começa e o volume da câmara de combustão aumenta, e à medida que o pistão se afasta do PMS, os gases de queima são movidos radialmente para fora, para preencher agora o aumento do volume nas paredes exteriores do cilindro. Este *squish* reverso ajuda a espalhar a frente da chama durante a parte tardia da combustão.

4.2.3 Dispersão turbulenta

A dispersão turbulenta é causada pelos vórtices no gás. A orientação aleatória das flutuações da velocidade turbulenta levam a uma dispersão homogênea mais rápida do que as gotas de líquido num gás escoando em regime laminar, e ao mesmo tempo a troca de quantidade de movimento entre o gás e o líquido regula o nível de turbulência na fase gasosa. Na Fig. 28 a estrutura de vórtice é a linha sólida, isto é, o caminho de uma porção infinitesimal de gás arbitrária dentro do escoamento turbulento. As gotas têm três possíveis trajetórias (linhas tracejadas) que começam na mesma posição que a porção infinitesimal de gás. Uma partícula é assumida que interage com um vórtice por um período de tempo (t_{int}), tomado como o menor tempo de vida do vórtice (t_e) ou o tempo necessário para que a gota passe através do vórtice (t_l), (Stiesch, 2003).

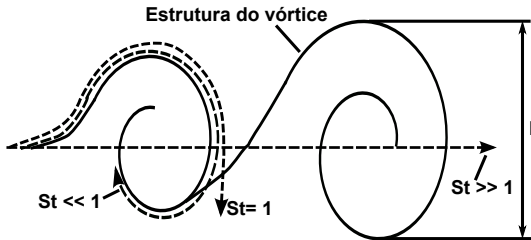


Figura 28 – Possíveis trajetórias da partícula em um escoamento turbulento. (Adaptado de (Stiesch, 2003))

$$t_{int} = \min(t_e, t_l) \quad (4.15)$$

O tamanho característico do vórtice é assumido que é a escala integral de comprimento (dissipação) considerado como o comprimento do vórtice que a gota necessita atravessar, calculado como

$$l = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}, \quad (4.16)$$

onde C_μ é a constante do modelo de turbulência $k - \varepsilon$ (0,09). Para turbulência isotrópica a energia cinética turbulenta é

$$k = \frac{2}{3}u'^2, \quad (4.17)$$

e então o tempo de vida do vórtice e o tempo de trânsito (para passar através do vórtice de tamanho l), são respetivamente

$$t_e = \frac{l}{u'} = \frac{C_\mu^{3/4} k}{\sqrt{2/3} \varepsilon}, \quad (4.18)$$

$$t_l = -\tau \ln \left[1 - \frac{l}{\tau |\vec{u} - \vec{v}|} \right], \quad (4.19)$$

onde \vec{v} é a velocidade da partícula e τ é o tempo de resposta aerodinâmico o qual é uma medida da capacidade de resposta da gotícula ao cambio na velocidade do gás (definido pela aceleração da partícula), calculado como

$$\tau = \frac{8}{3} \frac{\rho_l r_p}{\rho_g C_D |\vec{u} - \vec{v}|}, \quad (4.20)$$

onde r_p é o radio da partícula, μ_g é viscosidade dinâmica do gás. Se a lei de Stokes (Equação (4.25)) é utilizada para o coeficiente de arrasto, então se obtém

$$\tau = \frac{2}{9} \frac{\rho_l r_p^2}{\mu_g}. \quad (4.21)$$

Quando $l \geq \tau |\vec{u} - \vec{v}|$ a equação de t_l não tem solução, e é interpretado como que o vórtice tem capturado a partícula e o tempo de interação é igual ao tempo de vida do vórtice (t_e). De acordo com (Crowe *et al.*, 2012), as gotas pequenas no escoamento turbulento seguem o escoamento do gás, em tanto que as gotas maiores com menor razão arrasto/inercia deixam a estrutura do vórtice de grandes escalas. Uma razão de escalas de tempo foi proposta, a qual assumindo arrasto de Stokes para as partículas, dá como número de Stokes

$$St = \frac{\tau}{t_e}, \quad (4.22)$$

e, de acordo com a Fig. 28, as partículas de números de Stokes menor que a unidade (partículas pequenas) são retidas dentro do

vórtice e seguem a estrutura do vórtice, as partículas de número de Stokes grandes não são afetadas pelo vórtice, e para partículas de números de Stokes próximo da unidade um efeito centrífugo pode acontecer, o qual levaria a uma dispersão das gotas que seria maior que a da fase gasosa.

Demonstrou-se que o nível de turbulência dentro de jatos de líquido em duas fases depende da carga de massa: ele diminui para maiores quantidades de massa de líquido disperso no jato turbulento, (Stiesch, 2003). Estes resultados indicam que a interação gota-turbulência tem influência moduladora sobre a turbulência da fase gasosa. Isto é geralmente levado em conta adicionando termos fontes nas equações de k e ε do modelo de turbulência. A destruição de energia cinética turbulenta devido a dispersão da gota \dot{W}^s , é (Stiesch, 2003)

$$\dot{W}^s = - \int f \rho_l \frac{4}{3} \pi r^3 \vec{F}' \cdot \vec{u}' d\vec{v} dr dT_d dy dj, \quad (4.23)$$

onde f é uma função das variáveis $(\vec{x}, \vec{v}, r, T_d, y, \dot{y}, t)$.

4.2.4 Arrasto e deformação da gota

A velocidade da gota é influenciada pela força de arrasto e a força gravitacional. A interação entre o líquido e o gás é complexa em escoamento turbulento, e esta interação determina a formação da mistura combustível-ar. O acoplamento entre as duas fases envolve dois aspectos os quais são os efeitos de gás a líquido e de líquido a gás. No acoplamento de gás a líquido a mudança de velocidade da gota no domínio computacional é determinada pela força de arrasto atuando na gota (F_d) calculada pela velocidade relativa entre a gota e o gás.

No acoplamento líquido-gás o efeito do movimento do líquido sobre a fase gasosa é tratado como o termo fonte na implementação Lagrangiana das equações de momento na implementação Euleriana. O termo fonte de momento é calculado somando a taxa de mudança de quantidade de movimento de todas as gotas no espaço e no tempo.

Para uma gota dentro de um escoamento de gás, a força de arrasto atuando sobre a gota é

$$\rho_l V_p \vec{F}_d = \frac{1}{2} \rho_g C_D A_p |\vec{u} - \vec{v}| (\vec{u} - \vec{v}), \quad (4.24)$$

onde a velocidade e massa específica do gás são \vec{u} e ρ_g respectivamente, A_p é a área projetada da partícula, \vec{v} é a velocidade da gota e C_D é o coeficiente de arrasto. Para velocidades relativas baixas ao redor de $Re \leq 1$, a força de arrasto é devida ao atrito por tensão viscosa, e o coeficiente de arrasto é formulado pela lei de Stokes,

$$C_D = \frac{24}{Re}, \quad (4.25)$$

$$Re = \frac{2r_p\rho_g|\vec{u} - \vec{v}|}{\mu_g}. \quad (4.26)$$

Para Re grandes, ou grandes velocidades relativas como no spray em motores, o escoamento de gás separa-se da superfície da partícula, e o arrasto de forma torna-se cada vez mais importante em relação ao arrasto viscoso. O coeficiente de arrasto da esfera é amplificado e é definido como, (Stiesch, 2003)

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re} \left(1 + \frac{1}{6} Re^{2/3}\right) & \text{para } Re \leq 1000 \\ C_D = 0,424 & \text{para } Re > 1000 \end{cases} \quad (4.27)$$

As equações de coeficiente de arrasto são válidas para gotas esféricas, no entanto no spray de motores as gotas sofrem distorção antes da quebra. No modelo de quebra de Analogia de Taylor (*TAB*) discutido na secção 4.2.5.2, a viscosidade do líquido atua como um elemento amortecedor e a tensão superficial tem um efeito de força de restauração, e levando em conta este modelo de quebra, com o parâmetro adimensional de distorção (y), o coeficiente de arrasto é (Stiesch, 2003)

$$C_D = C_{D,esfera}(1 + 2,632y). \quad (4.28)$$

4.2.5 Modelagem de spray de combustível

O desenvolvimento do jato e crescimento de pequenas perturbações, que eventualmente produzem desintegração em ligações até a formação da gota, também são de importância na determinação da forma e penetração do spray, assim como as características detalhadas de massa específica, velocidade da gota, distribuição do tamanho da gota em função do tempo e espaço. Estas características são afetadas pela geometria interna do injetor, as propriedades

do gás circundante do spray e as propriedades físicas do líquido. A viscosidade atua no sentido de inibir o crescimento de instabilidades e retardar o início da desintegração. A turbulência no líquido junto com a cavitação no injetor e a interação aerodinâmica com o gás circundante contribuem à atomização, (Shi *et al.*, 2011).

Para analisar a atomização do combustível injetado no cilindro, são consideradas diferentes etapas ao longo da formação/destruição do jato tais como: quebra primária, quebra secundária e interação entre gotas ou colisão.

A evaporação da gota também é um processo importante, que envolve transferência de calor e massa. O calor é transferido à gota desde o gás circundante pela convecção, condução e radiação, e o vapor é transferido da gota por convecção e difusão. A taxa de evaporação depende da pressão, temperatura e propriedades de transporte do gás assim como da temperatura, volatilidade e diâmetro da gota e da velocidade relativa da gota com o gás circundante.

4.2.5.1 Modelagem da quebra primária

O processo de quebra primária é quando o líquido se desintegra em filamentos e gotas devido à interação com o gás circundante. As instabilidades na interface são as maiores forças que conduzem ao processo de quebra.

Método Blob. É um modelo que proporciona as condições das gotas iniciais do spray para os seguintes processos de quebra. O modelo assume que a quebra da gota dentro do spray denso perto do injetor, é um processo indistinguível e, então, a simulação detalhada pode ser substituída pela injeção de gotas esféricas grandes de tamanho uniforme (*blobs*), as quais estão depois sujeitas a quebra secundária induzida pela aerodinâmica, (Shi *et al.*, 2011).

O diâmetro destes *blobs* é igual ao diâmetro do furo, e o número de *blobs* injetados por unidade de tempo é determinado pela vazão de massa. O coeficiente de descarga C_d quantifica a diferença entre a vazão real de escoamento e a prevista usando a equação de Bernoulli. A equação de C_d é

$$C_d = \frac{u_{med}}{\sqrt{2(p_i - p_o)/\rho_L}}, \quad (4.29)$$

onde u_{med} é a velocidade média do líquido na saída, p_i é a pressão na entrada e p_o é a pressão na saída.

Para escoamento no injetor em cavitação total, a velocidade na saída e o tamanho inicial da gota são respetivamente

$$u_{eff} = u_{ven} - \frac{p_o - p_v}{\rho_L u_{med}}, \quad (4.30)$$

$$D_{eff} = D \left(\frac{u_{med}}{u_{eff}} \right), \quad (4.31)$$

onde p_v é a pressão de vapor do líquido e u_{ven} é a velocidade do escoamento na menor área.

Quebra induzida pela turbulência. O modelo assume que as forças turbulentas no líquido emergindo do injetor, são produtoras das perturbações superficiais iniciais as quais crescem exponencialmente devido às forças aerodinâmicas, formando novas gotas. O modelo inicia com a injeção de *blobs* de diâmetro igual ao diâmetro do furo. As ondas superficiais iniciais crescem, devido à velocidade relativa entre o gás e as gotas, e quebram com uma escala de comprimento característico de atomização L_A , e escala de tempo τ_A (Mecanismo Kelvin-Helmholtz (KH)). Os efeitos da turbulência são introduzidos postulando que a escala de comprimento característica de atomização L_A é proporcional à escala de comprimento turbulenta L_t e que a escala de tempo característico de atomização τ_A é uma combinação linear da escala de tempo turbulenta e a escala de tempo de crescimento de onda τ_w , (Baumgarten, 2006)

$$L_A = C_1 L_t = C_2 L_w, \quad (4.32)$$

$$\tau_A = C_3 \tau_t + C_4 \tau_w = \tau_{espontaneo} + \tau_{exponencial}, \quad (4.33)$$

onde $C_1 = 2, 0$, $C_2 = 0, 5$, $C_3 = 1, 2$, $C_4 = 0, 5$ e L_w é o comprimento de onda de perturbações superficiais determinadas por turbulência. O tempo de crescimento espontâneo é devido à turbulência do jato, em tanto que o tempo exponencial é causado pelo mecanismo de crescimento de onda KH, dado para um líquido não viscoso pela seguinte equação

$$\tau_w = \left[\frac{\rho_l \rho_g}{(\rho_l + \rho_g)^2} \left(\frac{u_{inj}}{L_w} \right)^2 - \frac{\sigma}{(\rho_l + \rho_g) L_w^3} \right]^{-1}. \quad (4.34)$$

Das escalas de comprimento e tempo de atomização são derivadas, a taxa de quebra primaria do *blob* e o tamanho das novas

gotas secundárias.

Quebra induzida pela cavitação. Este modelo supõe que as bolhas de cavitação são transportadas à superfície do *blob* pela velocidade turbulenta interna do líquido e estouram na superfície ou colapsam antes de alcançá-la. Para ambos os casos, uma escala característica de tempo é calculada, e o menor faz a quebra.

$$\tau_{cav} = \min(\tau_{est}, \tau_{colap}) \quad (4.35)$$

Para estimar o tempo de colapso, as bolhas são agrupadas em uma única bolha grande, artificial, que ocupa a mesma área transversal que todas as pequenas. Bolhas pequenas têm colapso mais cedo.

Para o estouro da bolha, embora as estruturas de cavitação geralmente estão localizadas ao longo da parede do orifício do injetor, a bolha artificial é colocada no centro do líquido e transportada à superfície com velocidade turbulenta $u_{turb} = (2k/3)^{0,5}$, resultando num tempo de explosão obtido como

$$\tau_{est} = \frac{r_{orif} - R_{cav}}{u_{turb}}. \quad (4.36)$$

onde R_{cav} é o raio efetivo de uma bolha equivalente (artificial).

A escala de tempo de atomização resultante τ_A é assumida como sendo mais pequena que τ_{colap} e τ_{est} , e a escala de comprimento de atomização é dada por

$$L_A = 2\pi(r_{orif} - R_{cav}). \quad (4.37)$$

Apesar de que a aerodinâmica e a turbulência são completas neste modelo, e que o modelo de atomização induzido por cavitação é bastante extenso e leva em conta todos esses efeitos importantes, o modelo de cavitação é baseado em grandes simplificações.

Quebra induzida pela cavitação e turbulência. Nishimura e Assanis (2000) apresentam o modelo de quebra primária induzido pela cavitação e turbulência que leva em conta a energia de cavitação, turbulência e colapso da bolha. Ligações cilíndricas discretas com diâmetro D e volume igual a uma gota de diâmetro D são injetados. Cada cilindro contém bolhas de acordo a fração de volume e distribuição de tamanho do orifício de saída, calculado de um modelo fenomenológico de cavitação dentro do injetor. Este sub

modelo de cavitação também fornece a energia cinética turbulenta k_{esc} e a velocidade de injeção u_{inj} . As bolhas colapsam fora do injetor e a energia $E_{bolh} = \Delta V_{bolh} p_b$ é liberada, produzindo incremento de energia cinética turbulenta $k_{bolh} = \sum E_{bolh}/m_{cil}$. A redução do volume da bolha durante o colapso é calculada da teoria da Rayleigh de dinâmica de bolhas. Assumindo turbulência isotrópica, a velocidade turbulenta de líquido dentro do cilindro é

$$u_{turb} = \sqrt{\frac{2(k_{bolh} + k_{esc})}{3}}. \quad (4.38)$$

É assumido que as variações da velocidade no interior do cilindro induz a força de deformação na superfície F_{turb} . Há quebra, se a soma de F_{turb} e a força de arrasto aerodinâmico $F_{aero} = \pi(\rho_g/3)D_{orif}^2 u_{rel}^2$ já não é mais compensada pela força de tensão superficial $F_{sup} = \pi D \sigma$. Neste caso o diâmetro do cilindro original é reduzido até $F_{turb} + F_{aero} = F_{sup}$ novamente.

O tamanho e as componentes da velocidade das gotas são calculadas baseado na solução local de escalas de turbulência e taxa de quebra, no núcleo da superfície. O modelo usa informação detalhada de simulação de cavitação de escoamentos turbulentos em injetores 3D, como dados de entrada. Primeiramente os dados são usados para estimar a erosão do jato e a forma 3D da região central. Em segundo lugar, é usado um sub modelo baseado na teoria de cavitação dinâmica de bolhas de Rayleigh, para determinar o incremento da turbulência devido a oscilações de bolhas colapsando no núcleo. Em terceiro lugar, uma versão avançada do modelo de quebra induzida pela turbulência é aplicada localmente nos elementos da superfície os quais representam as fontes de produção de gotas. A escala de comprimento turbulento determina a escala de comprimento de atomização L_A , e o tamanho de gota $r_{gota} = L_A/2$, em tanto que a escala de tempo de quebra τ_A é uma combinação linear da aerodinâmica (modelo KH) e escala de tempo turbulento. Das escalas de comprimento de atomização local e de tempo, a taxa de quebra local é calculada. O modelo finalmente entrega o tamanho inicial e velocidade tanto como o ângulo inicial do spray.

4.2.5.2 Modelagem da quebra secundaria

A quebra secundaria é a desintegração de gotas que foram formadas na quebra primaria, em gotas menores devido às forças aerodinâmicas induzidas pela velocidade relativa entre a gota e o

gás circundante.

Modelo de quebra Analogia de Taylor (TAB). O modelo de quebra de Analogia de Taylor, é um método para calcular a distorção da gota e a quebra, baseado na analogia entre um sistema do tipo massa-mola oscilante forçado, e uma gota oscilante que penetra em uma atmosfera gasosa com velocidade relativa u_{rel} . A força F iniciando a oscilação da massa corresponde as forças aerodinâmicas deformando a gota, Fig. 29. A força de restauração $F_{mol} = kx$ é análoga à força de tensão superficial. A força de amortecimento $F_{amort} = d\dot{x}$, corresponde às forças de atrito no interior da gota devido à viscosidade dinâmica do líquido μ_l , (Baumgarten, 2006).

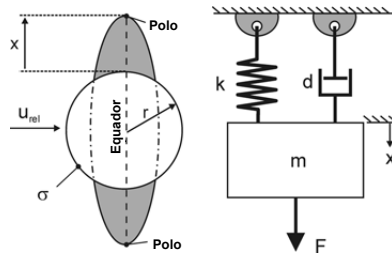


Figura 29 – Modelo de Quebra Analogia de Taylor. (Adaptado de (Baumgarten, 2006))

É obtida a solução analítica do movimento para o sistema massa-mola amortecido em termos de deslocamento não dimensional $y = x/(C_b r)$ assumindo velocidade relativa constante u_{rel} , onde a constante C_b é igual a 0,5.

Antes da quebra, a energia da gota é a soma da sua energia mínima de superfície e da energia de oscilação e distorção, e depois da quebra, é assumido que as gotas são esféricas e que não oscilam.

Modelo de quebra de Kelvin-Helmholtz (KH). Este modelo de quebra é baseado na análise linear de instabilidade crescente sobre a superfície de um jato líquido cilíndrico com raio inicial r_o , penetrando em um gás estacionário com uma velocidade relativa u_{rel} , e que o líquido e o gás são incompressíveis e que o gás não é viscoso. É assumido que devido à turbulência gerada no interior do orifício do injetor, a superfície do jato é coberta com um espectro de ondas de superfície sinusoidal com um deslocamento axissimétrico

infinitesimal $\eta = \eta_0 e^{ikz + \omega t}$ ($\eta \ll r$) causando pequenas pressões flutuantes axissimétricas, bem como componentes axial e radial da velocidade no líquido e no gás, (Richards *et al.*, 2016).

A análise proporciona uma equação de dispersão onde relaciona a taxa de crescimento ω (aumento de amplitude por unidade de tempo) de uma perturbação com seu comprimento de onda $\lambda = 2\pi/k$, onde k é número de onda. A solução numérica da função de dispersão mostra que há um máximo na curva de taxa de crescimento de onda $\omega = \omega(k)$ (ou onda mais instável) para dadas condições do escoamento. Assumindo que a máxima taxa de crescimento é $\omega = \Omega$ e que o correspondente comprimento de onda é Λ , onde esta onda de máximo crescimento finalmente é tirada do jato e forma novas gotas, Fig. 30.

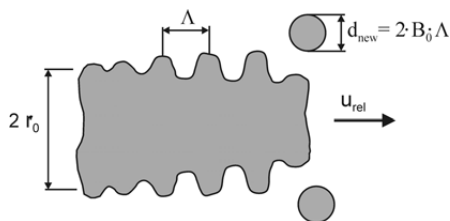


Figura 30 – Modelo de quebra de Kelvin-Helmholtz. (Adaptado de (Baumgarten, 2006))

A taxa de máximo crescimento Ω e o correspondente comprimento de onda Λ , estão dados pelas seguintes equações

$$\frac{\Lambda}{r_o} = 9,02 \frac{(1 + 0,45Oh_l^{0,5})(1 + 0,4T^{0,7})}{(1 + 0,87We_g^{1,67})^{0,6}}, \quad (4.39)$$

$$\Omega \left[\frac{\rho_l r_o^3}{\sigma} \right]^{0,5} = \frac{(0,34 + 0,38We_g^{1,5})}{(1 + Oh_l)(1 + 1,4T^{0,6})}, \quad (4.40)$$

onde são considerados o número de Ohnesorge do líquido (Oh_l), o número de Weber do líquido e do gás (We_l , We_g), o número de Taylor ($T = Oh_l \sqrt{We_g}$) e o número de Reynolds do líquido (Re_l), e é usada a velocidade relativa entre o gás e a gota para o cálculo dos números adimensionais.

O diâmetro inicial da gota é assumido como igual ao diâmetro do furo, e o processo de atomização é modelado usando a análise de

instabilidade descrito anteriormente. Neste modelo, o radio da gota da quebra (r) é proporcional ao comprimento de onda da Equação (4.47)

$$r = B_o \Lambda, \quad (4.41)$$

onde B_o é uma constante do modelo igual a 0,61. Valores pequenos de B_o dão como resultado gotas pequenas da quebra e valores grandes resultam em gotas grandes. A taxa de mudança de raio de gota em uma parcela é dado por

$$\frac{dr_o}{dr} = -\frac{(r_o - r)}{\tau_{KH}}, \quad (4.42)$$

$$\tau_{KH} = \frac{3,726 B_1 r_o}{\Lambda \Omega}, \quad (4.43)$$

onde τ_{KH} é o tempo de quebra e B_1 é a constante de tempo de quebra. B_1 é relacionada com o nível de perturbação inicial no jato líquido.

Modelo de quebra de Rayleigh-Taylor (RT). O modelo de quebra de Rayleigh-Taylor, é baseado na instabilidade da interface entre dois fluidos de massa específica diferentes. No caso de aceleração normal à interface, Fig. 31, a desintegração das gotas é induzida pela inercia do líquido se as gotas e ligações, que saem do injetor com alta velocidade, são fortemente desaceleradas pela força de arrasto aerodinâmico (Equação (4.24)). Usando análise de estabilidade linear, a taxa de crescimento Ω e o comprimento de onda Λ , da onda de mais rápido crescimento, negligenciando a viscosidade do gás e do líquido podem ser descritas como

$$\Omega = \sqrt{\frac{2[a(\rho_l - \rho_g)]^{3/2}}{3\sqrt{3\sigma}(\rho_l + \rho_g)}}, \quad (4.44)$$

$$\Lambda = 2\pi \sqrt{\frac{3\sigma}{a(\rho_l + \rho_g)}}. \quad (4.45)$$

O tempo de quebra $t_{bu} = \Omega^{-1}$, é o inverso da frequência de onda de crescimento mais rápido. Neste tempo, a gota é desintegrada em pequenas gotas de $r_{nova} = \Lambda$.

Neste modelo pode ser incluída a viscosidade a qual tem um grande efeito na desaceleração das gotas, e então a taxa de cresci-

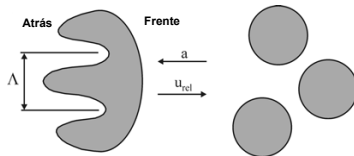


Figura 31 – Modelo de quebra de Rayleigh-Taylor. (Adaptado de (Baumgarten, 2006))

mento pode ser escrita como

$$\omega = -k_{RT}^2 \left(\frac{\mu_l + \mu_g}{\rho_l + \rho_g} \right) + \sqrt{k_{RT}^2 \left(\frac{\rho_l - \rho_g}{\rho_l + \rho_g} \right) a - \frac{k_{RT}^3 \sigma}{\rho_l + \rho_g} + k_{RT}^4 \left(\frac{\mu_l + \mu_g}{\rho_l + \rho_g} \right)^2}, \quad (4.46)$$

onde k_{RT} é o número de onda correspondente à taxa de máximo crescimento, dada por $k_{RT} = 2\pi/\Lambda$.

Modelo de quebra combinado KH-RT. O modelo considera um núcleo intacto definido por um comprimento de quebra (L_b), e neste comprimento de quebra é assumido que só as instabilidades de KH são responsáveis pela quebra. Fora de este comprimento característico (L_b), atuam os dois mecanismos de quebra (KH e RT), (Richards *et al.*, 2016).

$$L_b = C_{bl} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} d_o. \quad (4.47)$$

A constante de comprimento de quebra (C_{bl}) pode ser usada para aumentar ou diminuir a quebra do spray, e podem ser usados valores de 0 até 50, onde um valor de 0 resulta em que os dois mecanismos de quebra (KH e RT) atuam nas gotas, uma vez que elas saem do injetor. A quebra secundária pode ser modificada ajustando o comprimento de quebra L_b e as constantes do modelo KH e RT.

Uma alteração do modelo de KH-RT permite usar a simulação com os dois mecanismos de quebra sem o uso de o comprimento de quebra (L_b). Nesta alteração do modelo KH-RT, as instabilidades aerodinâmicas são responsáveis pela quebra primária dos *blobs* de líquido injetado (conhecidos como pais). Gotas “filhas” são criadas

neste processo e a quebra secundária destas gotas é modelada pela competência dos efeitos dos mecanismos KH e RT. A ativação deste mecanismo requer especificar que são criadas novas parcelas “filhas” quando é usado o modelo KH.

4.2.5.3 Interação entre gotas

A colisão de gotas é importante na região do spray denso, perto do injetor de injeção, onde o número de gotas por unidade de volume é grande e a probabilidade de colisão é alta. O resultado da colisão depende da energia de impacto, razão do tamanho de gotas e condições circundantes como massa específica do gás, viscosidade e a razão combustível-ar circundante das gotas no impacto. Há quatro parâmetros adimensionais importantes governantes da colisão: número de Reynolds (Re), número de Weber (We), razão de diâmetro da gota (Δ) e parâmetro de impacto (B), (Baumgarten, 2006)

$$\Delta = \frac{d_2}{d_1}, \quad B = \frac{2X}{d_1 + d_2}, \quad (4.48)$$

$$u_{rel} = \sqrt{u_1^2 + u_2^2 - 2u_1u_2 \cos \alpha}. \quad (4.49)$$

onde u_1 e d_1 são a velocidade e o diâmetro da gota grande, u_2 e d_2 são a velocidade e o diâmetro da gota pequena, α é o ângulo de colisão entre as trajetórias das gotas, X é a projeção da distância entre centros das gotas na direção normal a u_{rel} , Fig. 32. B é um parâmetro adimensional de impacto que varia de zero a um.

Mais parâmetros são mostrados na Fig. 32.

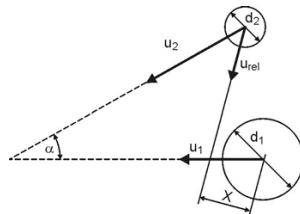


Figura 32 – Parâmetros de colisão. (Adaptado de (Baumgarten, 2006))

Os possíveis resultados de um evento de colisão podem ser divididos em cinco regimes: saltos, coalescência, separação reflexiva,

separação estendida e quebra.

Modelo O'Rourke. É o modelo que considera dois resultados principais da colisão: coalescência e separação de quebra. Um balanço de energia é realizado para prever se as duas gotas que se aglutinam no momento da colisão, separam-se novamente para formar as gotas originais ou combinam-se para formar uma gota maior. Se a energia de rotação das gotas aglomeradas, é maior que a energia extra superficial é assumido que ocorre a separação de quebra, de outra maneira a coalescência permanente ocorre.

A implementação em CFD da colisão de gotas pode ser de forma estatística ou determinística. A aproximação determinística usa o vetor de posição e velocidade de todas as parcelas usando-as para verificar a possibilidade de colisão para todos os pares de parcelas, requisitando este método muito recurso computacional. No método estatístico só colisões de parcelas que se encontram na mesma célula computacional são considerados, onde todas as combinações de pares de parcelas são verificadas, assumindo que as gotas de ambas as parcelas são homogeneamente distribuídas na célula de volume V_{cel} . O número de colisões de uma gota da parcela 1 de gotas grandes (N_1 gotas de diâmetro d_1) com todas as gotas pequenas (parcela 2, de N_2 gotas de diâmetro d_2), é previsto, e assume-se que todas as outras gotas grandes da parcela 1 têm o mesmo comportamento. As gotas grandes são chamadas “coletor” e a probabilidade de que o coletor colida com k gotas da parcela 2 segue a distribuição de Poisson.

Modelo No Time Counter (NTC). O método é baseado em dinâmica de gases para cálculos de simulação direta Monte Carlo (DSMC). O modelo NTC envolve sub amostragem de parcelas dentro de cada célula, e é derivado do modelo básico de probabilidade para colisão.

O método NTC primeiro ordena as parcelas em grupos que residem na mesma célula. Isto requer apenas $2N$ operações, onde N é o número de gotas de uma célula. Em seguida, pega uma sub amostra estocástica de todos os possíveis pares de uma célula. As probabilidades para os pares da sub amostra são multiplicadas pelo recíproco desta fração, aumentando a probabilidade de colisão. A amostragem é feita com reposição para que várias colisões para um par possa ser corretamente calculada. O método resultante incorre um custo que é linearmente proporcional ao número de volumes,

em oposição ao custo N-quadrado de diversos métodos existentes, (Richards *et al.*, 2016).

4.2.5.4 Modelagem de evaporação de gota

Nos motores a combustão interna de ignição por compressão, a gota é evaporada e atua como vapor combustível que é queimado num ambiente oxidante por uma chama difusiva ao redor da gota. O principal propósito da atomização é aumentar a área de superfície de combustível para facilitar a taxa de transferência de calor dos gases circundantes para o combustível, e ao mesmo tempo dependendo das condições do gás, a gota perde parte de sua massa por vaporização e difusão para o gás circundante. Depois de um tempo, a gota atinge a sua temperatura de estado estável. As gotas grandes levam mais tempo para atingir sua condição de equilíbrio e as gotas pequenas evaporam mais rápido produzindo vapor de combustível que é misturado com ar, para gerar depois a ignição.

Evaporação em estado estável. A evaporação em estado estável pode ser um termo impróprio devido a que a gota de combustível pode não atingir o estado estável no seu tempo de vida, por causa dos componentes no combustível, onde cada componente possui as suas diferentes propriedades físicas e químicas. Mas, para muitos combustíveis é conveniente considerar estado estável para estimar a taxa de evaporação e tempo de vida da gota com nível razoável de segurança.

Um modelo simples de evaporação da gota envolve transferência de massa e assume que a temperatura na superfície da gota é de um valor perto ao do ponto de ebulição da gota, e a taxa de evaporação é controlada pela taxa de transferência de calor do gás circundante para a superfície da gota. Na Fig. 33 são definidas as coordenadas da gota, onde r é variável, r_s é o raio da gota na interface líquido-vapor, e longe da superfície da gota ($r \rightarrow \infty$) a temperatura é T_∞ . A perda de massa faz com que o raio da gota diminua até que a gota seja totalmente evaporada $r_s = 0$. Para conhecer o raio da gota em função do tempo (tempo de vida da gota), é preciso conhecer a vazão de massa de vapor de combustível em função do tempo. Nesta modelagem são adotadas as seguintes hipóteses, (Turns, 2000): a gota evapora num ambiente quiescente infinito; o processo de evaporação é quase estável; o combustível é um componente líquido com zero solubilidade para o gás; a temperatura da gota é uniforme e no ponto de ebulição do combustível

$T_d = T_{ebul}$; a difusão é binária com número de Lewis sendo igual a 1,0 ($Le = \alpha/\mathcal{D}$ ou $\alpha = \mathcal{D}$); todas as propriedades termo físicas (condutividade, massa específica, calor específico), são constantes.

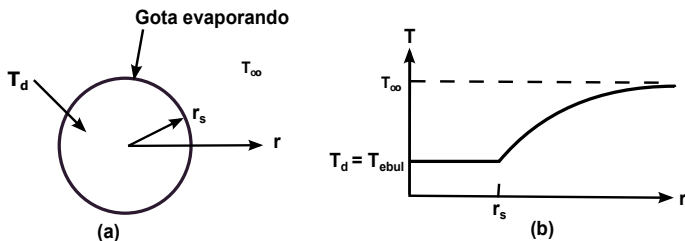


Figura 33 – Evaporação de gota de combustível líquido em ambiente quiescente. (Adaptado de (Turns, 2000))

No momento da injeção, a concentração de vapor de combustível na superfície do líquido é baixa e a transferência de massa neste estado inicial é pequena. Inicialmente todo o calor transferido à gota serve para aumentar sua temperatura, e ao aumentar a temperatura do líquido é formado vapor na superfície da gota com dois efeitos: parte do calor transferido à gota é necessário para fornecer o calor de vaporização do líquido, e o fluxo de vapor para fora do combustível impede a taxa de transferência de calor à gota. Finalmente, é atingido o estado onde todo o calor transferido à gota é usado como calor de vaporização.

Negligenciando a difusão térmica e assumindo que a força motriz para a difusão de espécies é um gradiente de concentração na direção do caminho de difusão, é obtida a seguinte expressão para a evaporação de gota, (Lefebvre, 1989)

$$\frac{dY_f}{dr} = -\frac{RT}{\mathcal{D}p}(\dot{m}_f'' Y_A), \quad (4.50)$$

onde Y_f é a fração de massa de combustível, Y_A é a fração de massa de ar, \dot{m}_f'' é a vazão de massa de difusão por unidade de área, p é a pressão do gás.

A vazão de massa é constante e independente do raio da gota $\dot{m} = \dot{m}_F = \rho v_r 4\pi r^2 = cte$, onde v_r é a velocidade do escoamento. A vazão de massa por unidade de área na superfície da gota considerando a equação de continuidade é dada por

$$\dot{m}_{f_s}'' 4\pi r_s^2 = \dot{m}_f'' 4\pi r^2. \quad (4.51)$$

A solução da Equação (4.50) para a vazão de massa na superfície da gota com as condições de contorno de T_s e Y_1^* na superfície da gota (Equação (4.80)), e T_∞ e Y_1 (fração de massa de vapor) em $r = \infty$, é

$$\dot{m}_{fs} = \frac{4\pi k_g r_s}{C_{pg}} \ln [1 + B_d], \quad (4.52)$$

$$B_d = \frac{Y_1^* - Y_1}{1 - Y_1^*}. \quad (4.53)$$

Se a taxa de transferência de calor é controlada pela evaporação, a vazão de evaporação de combustível pode ser dada em função do número de transferência de calor (B_T), considerando que o número de Lewis (Le) é igual à unidade. Para evaporação em estado estável o número de transferência de massa (B_d) é igual ao número de transferência de calor (B_T), dado por

$$B_T = \frac{C_{pg}(T_\infty - T_s)}{h_{fg}}. \quad (4.54)$$

O B_T representa a razão entre a entalpia disponível no gás circundante e o calor requerido para evaporar o combustível. A vantagem de usar a Equação (4.52) com B_d é que ela pode ser usada incluindo o estado transiente de evaporação da gota, no entanto se é usada como B_T só pode ser para o estado estável.

No período de estado estável, em uma gota evaporando, seu diâmetro em qualquer instante pode ser relacionado com seu diâmetro inicial pela seguinte equação chamada de lei do diâmetro ao quadrado

$$D^2(t) = D_o^2 - Kt, \quad (4.55)$$

$$K = \frac{8k_g}{\rho_l C_{pg}} \ln(1 + B_d), \quad (4.56)$$

onde K é chamada de constante de evaporação, a qual é definida como $K = d(D)^2/dt$.

O tempo para que a gota seja evaporada totalmente, ou tempo de vida da gota t_d é calculado como

$$t_d = \frac{D_o^2}{K} = \frac{\rho_l C_{pg} D_o^2}{8k_g \ln(1 + B_d)}. \quad (4.57)$$

Nos sistemas de combustão, o combustível líquido é vaporizado em uma zona de chama, e então a evaporação ocorre em

ambiente de alta temperatura, e para esta temperatura elevada, a temperatura de bulbo úmido é apenas ligeiramente inferior à temperatura de ebulição para esta pressão. Para altas temperaturas é satisfatório substituir a temperatura da superfície da gota (T_s), pela temperatura de ebulição (T_b), para estado estável na Equação (4.54), (Lefebvre, 1989).

Período transiente na evaporação da gota. Para a relação entre D^2 da gota e o tempo, no período de evaporação, em uma gráfica de D^2 vs t , é possível ver que existe uma primeira região de evaporação onde a inclinação da linha D^2/t é zero e depois a inclinação da linha aumenta gradualmente com o tempo ate que a gota atinge sua temperatura de bulbo húmido, depois do qual a inclinação da linha D^2/t é mantida constante na maioria do tempo de vida da gota. Desta forma o processo de evaporação da gota pode ser dividido em um estado transiente e em um estado estável.

O período transiente é considerado como um período de aquecimento na evaporação da gota. Para fazer um cálculo do tempo requerido para o aquecimento da gota, é feita uma análise onde o calor disponível para o aquecimento da gota é a diferença entre o calor transferido à gota e o calor usado na evaporação da gota de combustível. Em (Lefebvre, 1989), o tempo do período de aquecimento (Δt_{hu}) é obtido como

$$\Delta t_{hu} = \frac{C_{pf} \rho_l C_{pg} D_{hu}^2 (T_{sst} - T_{so})}{12k_g \ln(1 + B_d) L (B_T/B_d - 1)}, \quad (4.58)$$

$$D_{hu} = D_o \left[1 + \frac{C_{pf} (T_{sst} - T_{so})}{2L (B_T/B_d - 1)} \right]^{-0,5}, \quad (4.59)$$

onde D_{hu} é o diâmetro médio efetivo no período de aquecimento, L é o calor latente de vaporização, T_{so} é temperatura inicial na superfície da gota, T_{sst} é a temperatura na superfície da gota ao final do período de aquecimento ou temperatura do estado estável.

O diâmetro da gota ao final do período de aquecimento é calculado da seguinte forma

$$D_1^2 = D_o^2 - K_{hu} \Delta t_{hu}, \quad (4.60)$$

$$K_{hu} = \frac{D_o^2 - D_1^2}{\Delta t_{hu}}. \quad (4.61)$$

Quando o período de aquecimento é grande e não pode ser negligenciado, o tempo de vida da gota corresponde ao tempo de aquecimento mais o tempo de estado estável assim

$$t_d = \Delta t_{hu} + \frac{D_1^2}{K_{st}} = \frac{D_o^2 - D_1^2}{K_{hu}} + \frac{D_1^2}{K_{st}}. \quad (4.62)$$

A mudança de T_{so} afeta só o período de aquecimento e não tem influência no processo de evaporação, contudo, um aumento na temperatura do ar circundante diminui o período de aquecimento e o período de estado estável.

Gota na presença de escoamento. Os efeitos da convecção na evaporação da gota de combustível existem quando se tem movimento relativo entre a gota e o gás circundante. Ao analisar a Equação (4.58), é possível ver que o período de aquecimento não é afetado pelos efeitos da convecção. No entanto, as taxas de evaporação são reforçadas pela convecção diminuindo de esta forma o tempo do estado estável na evaporação. Para incluir a convecção na queima da gota, é feita a aproximação da teoria de radio de película, onde o radio de película para a transferência de calor δ_T é definido em termos de número de Nusselt (Nu), e o radio de película para a transferência de massa δ_M é definido em termos de número de Sherwood (Sh), (Turns, 2000), assim

$$\frac{\delta_T}{r_s} = \frac{Nu}{Nu - 2} \quad (4.63)$$

$$\frac{\delta_M}{r_s} = \frac{Sh}{Sh - 2} \quad (4.64)$$

Para um meio estagnado, $Nu = 2$. Consistente com o número de Lewis de 1, é assumido que $Sh = Nu$. Levando em conta que para propriedades constantes de um fluido sem convecção, o número de Nusselt é dado por

$$Nu = 2 \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T}. \quad (4.65)$$

Como B_T tende para zero, o termo $\ln(1 + B_T)/B_T$ é aproximado a 1, então $Nu = 2$, o qual é um valor normal para baixas taxas de transferência de calor numa esfera.

Nos estudos experimentais e teóricos de Frossling, é mostrado que os efeitos da convecção nas taxas de transferência de calor e

massa pode ser modelado com um fator de correção que é função do número de Reynolds e do número de Schmid (ou Prandtl). Para taxas de difusão controladas, o fator de correção é, (Lefebvre, 1989)

$$1 + 0,276Re_d^{1/2}Sc_g^{1/3}. \quad (4.66)$$

Para o caso onde a taxa de transferência de calor é controlada, o fator de correção é

$$1 + 0,276Re_d^{1/2}Pr_g^{1/3}. \quad (4.67)$$

O termo de velocidade no número de Reynolds é a velocidade relativa entre a gota e o gás circundante. Mais uma correlação para transferência de calor com convecção é dada por Ranz e Marshall para um fator de correção de $1 + 0,36Re_d^{1/2}Pr_g^{1/3}$, como

$$Nu = 2 + 0,6Re_d^{1/2}Pr_g^{1/3}. \quad (4.68)$$

A constante de evaporação e o diâmetro médio da gota no período de aquecimento com convecção forçada são respetivamente

$$K'_{hu} = K_{hu} \left[1 + 0,3 \left(\frac{\rho_g D'_{hu} u'}{\mu_g} \right)^{1/2} Pr_g^{1/3} \right], \quad (4.69)$$

$$D'_{hu} = 0,25 \left(D_o^{\frac{1}{2}} + \left\{ D_o^2 - K_{hu} \Delta t_{hu} \left[1 + 0,3 \left(\frac{\rho_g D'_{hu} u'}{\mu_g} \right)^{\frac{1}{2}} Pr_g^{\frac{1}{3}} \right] \right\}^{\frac{1}{4}} \right)^2 \quad (4.70)$$

Para o período de estado estável com convecção forçada, a constante de evaporação e o diâmetro médio da gota são

$$K'_{st} = K_{st} \left[1 + 0,3 \left(\frac{\rho_g D'_{st} u'}{\mu_g} \right)^{1/2} Pr_g^{1/3} \right], \quad (4.71)$$

$$D'_{st} = 0,25(D_o^2 - K'_{hu} \Delta t_{hu})^{1/2}. \quad (4.72)$$

No período de aquecimento a maior parte do calor transferido à gota é absorvido para o aquecimento e a quantidade de calor disponível para evaporação é pequena. Uma baixa taxa de evaporação neste período significa que o tempo total de vida da gota é muito

maior, que quando é considerado período de aquecimento como zero. Para efeitos práticos é conveniente que o período de aquecimento seja combinado com a convecção forçada, calculando uma constante de evaporação efetiva, para ser designada a qualquer combustível em diferentes condições de pressão, temperatura, velocidade e tamanho de gota.

$$K_{eff} = \frac{D_o^2}{t_d}, \quad (4.73)$$

onde t_d é o tempo total de vida requerido para evaporar a gota de combustível, incluindo convecção e aquecimento transiente calculado da seguinte forma

$$t_d = \Delta t_{hu} + \frac{D_o^2 - K_{hu}\Delta t_{hu}(1 + 0,30Re_{hu}^{\frac{1}{2}}Pr_g^{\frac{1}{3}})}{K_{st}(1 + 0,30Re_{st}^{\frac{1}{2}}Pr_g^{\frac{1}{3}})}, \quad (4.74)$$

onde Re_{hu} e Re_{st} são baseados em D_{hu} e D_{st} , respetivamente.

Correlação de Frossling. Usando a correlação de Frossling, quando injetado o combustível formando gotas, o modelo determina a taxa de variação do raio da gota devido a evaporação da seguinte forma, (Richards *et al.*, 2016)

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{\rho_g D}{2\rho_l r} B_d Sh_d, \quad (4.75)$$

onde D é a difusibilidade de massa, B_d é o número de transferência de massa e Sh_d é o número de Sherwood dado como

$$Sh_d = (2 + 0,6Re_d^{1/2} Sc^{1/3}) \frac{\ln(1 + B_d)}{B_d}, \quad (4.76)$$

$$Re_d = \frac{\rho_g |u_i + u_i - v'_i| d}{\mu_{ar}}, \quad (4.77)$$

$$Sc = \frac{\mu_{ar}}{\rho_g D}, \quad (4.78)$$

$$\rho_g D = 1,293 D_o \left(\frac{\bar{T}}{273} \right)^{\eta_o - 1}, \quad (4.79)$$

$$Y_1^* = \frac{M_{C_n H_{2m}}}{M_{C_n H_{2m}} + M_{mix} \left(\frac{p_g}{p_v} - 1 \right)}, \quad (4.80)$$

onde d é o diâmetro da gota, μ_{ar} é a viscosidade do ar avaliada à temperatura $\bar{T} = (T_g + 2T_d)/3$, T_g é a temperatura do gás, T_d é temperatura da gota, Sc é o número de Schmidt, Y_1 é a fração de massa do vapor, Y_1^* é a fração de massa do vapor na superfície da gota, D_o e η_o são constantes experimentais do modelo.

Correlação de Chiang. A modelagem da correlação de Chiang define que a taxa de variação do raio da gota é dada por, (Richards *et al.*, 2016)

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{\rho_g D}{2\rho_l r} B_d Sh_d (Y_1^* - Y_1), \quad (4.81)$$

onde são usadas correlações alternativas para o número de Nusselt e de Sherwood, da seguinte forma,

$$Nu_d = 1,275(1 + B_d)^{-0,678} Re_d^{0,438} Pr_d^{0,619}, \quad (4.82)$$

$$Sh_d = 1,224(1 + B_d)^{-0,568} Re_d^{0,365} Sc_d^{0,492}. \quad (4.83)$$

Para o cálculo da temperatura na gota, nas correlações de Frossling e de Chiang, pode ser assumido que a temperatura é uniforme e são usadas equações diferenciais ordinárias (ODE) para as gotas menores num raio de gota especificado pelo usuário do software *Converge CFD*. Também pode se assumir que a temperatura da gota é esféricamente simétrica e usada uma equação diferencial parcial (PDE) para gotas maiores com um raio especificado.

Modelo de determinação de temperatura de gota ODE.

Este modelo utiliza o seguinte balanço de energia, (Richards *et al.*, 2016)

$$\bar{A}_d Q_d = c_l m_d \frac{dT_d}{dt} - \frac{dm_d}{dt} H_{vap}, \quad (4.84)$$

$$Q_d = \frac{Nu_d k_{ar} (T_g - T_d)}{\bar{d}_o}, \quad (4.85)$$

$$Nu_d = (2 + 0,6 Re_d^{1/2} Pr^{1/3}) \frac{\ln(1 + B_d)}{B_d}, \quad (4.86)$$

o qual define que a energia entregada à gota pode ser para aquecer a gota ou para evaporação. c_l é o calor específico do líquido, T_d é a temperatura da gota, m_d é a massa da gota, H_{vap} é o calor latente

de vaporização, k_{ar} é a condutividade do ar, \bar{A}_d é a área média da gota, \bar{d}_o é o diâmetro médio da gota e Q_d é a taxa de condução de calor à superfície da gota por unidade de área.

Modelo de determinação de temperatura de gota PDE.

Para o cálculo da temperatura da gota, é usada a seguinte equação de modo esférico (Sazhin et al., 2011)

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 k \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad (4.87)$$

$$k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} = h [T_g - T(R, t)] + \rho L \frac{dR}{dt}, \quad (4.88)$$

onde r é a distância desde o centro da gota, h é o coeficiente de convecção entre a gota e o gás circundante, T_g é a temperatura do gás, $R(t)$ é o radio da gota, C_p é o calor específico da gota, L é o calor de evaporação, ρ é a massa específica da gota e k é a condutividade térmica da gota.

É definido um k_{eff} para simular os efeitos de recirculação (não somente condução), para substituir k (Sazhin 2006),

$$k_{eff} = \chi k \quad (4.89)$$

com,

$$\chi = 1,86 + 0,86 \tanh(2,225 \log_{10}(0,03333 Pe_d)) \quad (4.90)$$

onde Pe_d é o número de Peclet da gota.

4.2.6 Combustíveis usados

Devido à necessidade de autoignição no processo de combustão do motor diesel, o combustível deve ter uma composição tal que a mesma produza valores de propriedades físicas e químicas para que a autoignição aconteça sob condições típicas da operação dos motores de ignição por compressão. O parâmetro que caracteriza a inflamabilidade é o número de cetano, o qual será tanto maior quanto maior for a capacidade de ignição. Em um combustível para motores diesel, o número de cetano deve estar entre 40 e 65, no caso de motores diesel modernos. Devido a esses requisitos, a massa molecular média é maior no caso dos combustíveis diesel que no dos combustíveis para motores de ignição por centelha.

Um problema importante na simulação da combustão de spray em um motor é a caracterização real do combustível, devido a que os combustíveis convencionais contêm centenas de compostos químicos e sua complexidade não pode ser totalmente representada em uma simulação, pois isto demanda enormes recursos computacionais em função do número de espécies químicas a ser levadas em conta nas equações de conservação (uma equação para cada espécie química do modelo cinético). Uma abordagem empregada por diversos autores é o uso de substitutos de combustível (*fuel surrogates*). Esta metodologia define um número reduzido de espécies químicas como sendo as representativas do combustível real, (Ramirez *et al.*, 2012b), (Toni *et al.*, 2016). A mistura deste número reduzido de espécies deve possuir propriedades físicas e químicas consistentes com as propriedades do combustível real.

O n-heptano como um componente simples tem sido usado como substituto do óleo diesel por (Reiter *et al.*, 2015), obtendo resultados de atraso de ignição comparáveis com as do óleo diesel, mas suas propriedades físicas são diferentes e a simulação da combustão diesel requer que coincidam as propriedades químicas e físicas.

Outra espécie química usada como substituto é o n-dodecano e misturas dele com outras espécies simples. Por exemplo (Pei *et al.*, 2015) fizeram uma validação de uma mistura de 77% de n-dodecano e 23% de m-xileno em volume, como substituto do óleo diesel obtendo adequada predição do atraso de ignição e do descolamento da chama.

Óleo diesel. A especificação ASTM International (ASTM D 975 - Especificação padrão para Óleos Diesel) prescreve as propriedades necessárias de óleo diesel e estabelece os limites para os valores dessas propriedades. Estes requisitos são listados na Tabela 3 para os sete tipos de combustível diesel definidos pela especificação.

Óleo vegetal de soja *in natura*. As vantagens dos óleos vegetais como combustível para motores diesel são: disponibilidade imediata, renovabilidade, menor conteúdo de enxofre e aromático e biodegradabilidade. As principais desvantagens dos óleos vegetais como combustível para motores diesel são viscosidade elevada, menor volatilidade e a reatividade das cadeias de hidrocarbonetos insaturados. De acordo com (Komers *et al.*, 2001) os problemas dos óleos vegetais nos motores de combustão interna são: a formação de

coque em injetores, depósitos de carvão, espessamento e gelificação do óleo lubrificante do motor. Os óleos vegetais são extremamente viscosos, com viscosidades de 10 a 17 vezes maiores do que a do diesel.

Com o objetivo de obter dados experimentais da operação do motor usando a maior quantidade de óleo vegetal de soja como combustível, foi feita uma mistura de 80% de óleo de soja *in natura* e 20% de diesel em volume, levando em conta que não foi possível a operação adequada do motor com 100% óleo vegetal de soja *in natura*, já que devido às propriedades do óleo vegetal puro na temperatura de injeção, o motor deixa de funcionar ao aumentar a carga sobre o dinamômetro.

4.2.6.1 Propriedades do óleo diesel e do óleo vegetal de soja

O combustível diesel usado nos testes experimentais foi o óleo diesel comercial do Brasil, o qual tem uma adição de 8% em volume de biodiesel, de acordo às regulamentações nacionais.

As propriedades termofísicas do óleo diesel e do óleo vegetal de soja *in natura*, usados nos testes experimentais durante o presente trabalho, foram obtidas por diferentes metodologias, e estas mesmas propriedades foram usadas como parâmetros de entrada nas simulações de spray e da combustão. As propriedades são mostradas como função da temperatura nas seguintes figuras.

A massa específica (ρ) em função da temperatura do diesel foi medida no LABCET e os dados experimentais foram ajustados de acordo com a sugestão de (Esteban *et al.*, 2012b), Fig. 34a.

Para o óleo de soja também foram feitas as medições de ρ em função da temperatura, e os dados experimentais foram correlacionados para obter a curva da Fig. 34a para soja. Ao comparar a massa específica da soja com a massa específica do diesel na faixa de temperatura de 280 K até 730 K, pode-se observar que a massa específica da soja é 1,3 vezes maior que a do diesel. Os dados experimentais e as correlações obtidas ficaram perto dos valores experimentais obtidos por (Esteban *et al.*, 2012b) para ambos combustíveis. Com os dados de ρ para o óleo de soja e para o diesel, obteve-se ρ_m em função da temperatura para a mistura 80s20d, (Fig. 34a), usando para o cálculo a fração de massa (Y_i) de cada um dos combustíveis na mistura 80s20d e fazendo $\rho_m = 1/(Y_1/\rho_1 + Y_2/\rho_2)$.

A viscosidade dinâmica (μ) para o diesel e para o óleo de soja

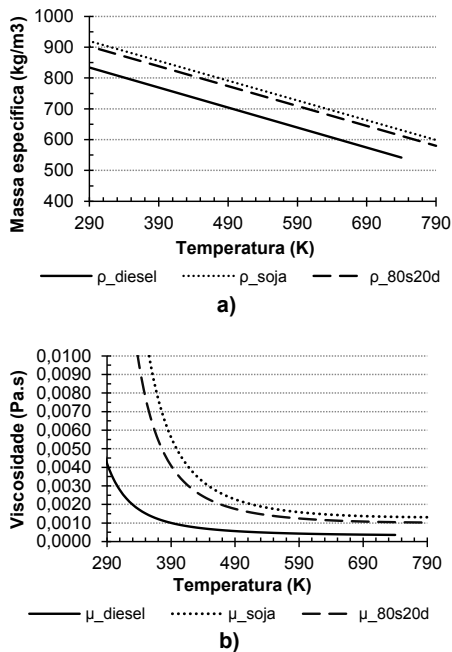


Figura 34 – Propriedades dos combustíveis em função de T. a) Massa específica, b) Viscosidade dinâmica. (Fonte: autor)

também foi medida e os resultados foram ajustados com a correlação de μ vs T de (Esteban *et al.*, 2012b). Na Fig. 34b são mostradas as curvas de μ em função da temperatura para o diesel e óleo de soja. Comparando os dois combustíveis em uma faixa de temperatura de 280 K até 730 K observa-se que a viscosidade dinâmica do óleo de soja é 5,5 vezes maior que a do diesel. Com esses dados obteve-se μ_m em função da temperatura para a mistura 80s20d (Fig. 34b), usando a fração de massa (Y_i) na equação de mistura de Granberg-Nissan: $Ln(\mu_m) = \sum Y_i Ln(\mu_i)$.

Nos dois combustíveis, a tensão superficial (σ) foi medida em função da temperatura, e os dados foram correlacionados linearmente, de acordo com os testes feitos por (Esteban *et al.*, 2012a) (Fig. 35a). Com os dados de σ para óleo de soja e do diesel, é obtida σ_m em função da temperatura para a mistura 80s20d, (Fig. 35a), usando a fração de massa (Y_i) na equação $\sigma_m = \sum w_i Y_i \sigma_i$ com $w_i = 1$ como o fator de ponderação.

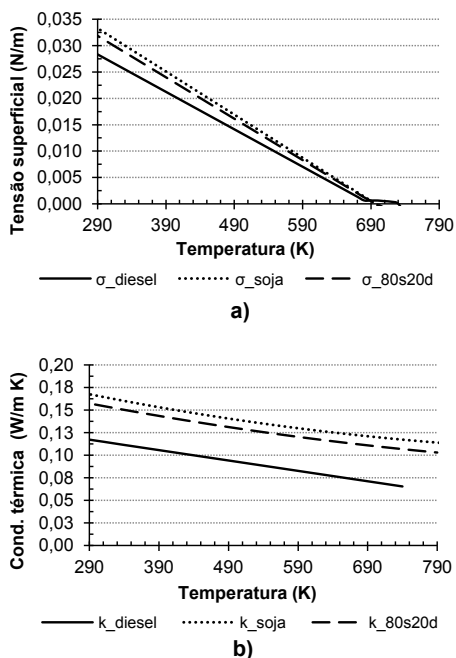


Figura 35 – Propriedades dos combustíveis em função de T. a) Tensão superficial, b) Condutividade térmica. (Fonte: autor)

A condutividade térmica (k) para o diesel, tem uma diminuição com o aumento da temperatura como pode ser constatada nos dados obtidos por (Sazhin *et al.*, 2005). Os dados de condutividade térmica para o diesel reportados na base de dados do *Converge CFD* estão próximos daqueles obtidos por (Sazhin *et al.*, 2005). Pela indisponibilidade de equipamento adequado para medir a condutividade térmica do diesel usado no LABCET, na simulação foram usados os dados do *Converge CFD*, os quais são mostrados na Fig. 35b.

Para o óleo de soja, foram obtidos dados experimentais de condutividade térmica por (Wu *et al.*, 2005) até uma temperatura máxima de 103°C, os quais mostram uma tendência igual à tendência da condutividade térmica para o diesel, mas sendo maiores os valores para o óleo de soja. Testes experimentais para o óleo de soja foram feitos também por (Hoffmann *et al.*, 2016) até uma temperatura máxima de 230°C, evidenciando que a condutividade térmica dos óleos vegetais diminui quando a temperatura aumenta. Os dados

experimentais de (Hoffmann *et al.*, 2016) foram correlacionados com uma equação polinomial para a soja, e seus resultados estão muito próximos aos valores obtidos por (Wu *et al.*, 2005). Levando em conta que a faixa de temperatura investigada por (Hoffmann *et al.*, 2016) é maior, esses dados foram usados na simulação, os quais estão representados na Fig. 35b. Com os dados de k do óleo de soja e do diesel, é obtida k_m em função da temperatura para a mistura 80s20d, de acordo com o mostrado na Fig. 35b, usando a fração de massa na equação de Jamieson: $k_m = Y_1 k_1 + Y_2 k_2 - \alpha(k_2 - k_1)(1 - Y_2^{1/2})Y_2$, onde α é um parâmetro ajustável (de valor 1 quando não se tem dados para a mistura disponíveis).

A pressão de vapor (p_v) do diesel tem sido correlacionada em função da temperatura por (Sazhin *et al.*, 2005) a partir de dados experimentais, e ao se fazer a análise destes dados com os obtidos para o diesel da base de dados de *Converge CFD*, os valores estão próximos, apresentando a mesma tendência. Para a simulação foram usados os dados do *Converge CFD*, os quais são mostrados na Fig. 36a.

Para o óleo de soja foram feitos testes experimentais de pressão de vapor em função da temperatura por (Perry *et al.*, 1949), e os dados foram correlacionados com a equação de Clausius-Clapeyron (obtendo os parâmetros A e B da equação). Estes dados quando comparados com os dados de pressão de vapor do diesel, pode se ver que para o óleo de soja a pressão de vapor é menor e a tendência da curva é parecida à o diesel. Para a obtenção de dados de pressão de vapor têm sido feitos testes experimentais por diferentes pesquisadores e também foram feitas estimações usando o método de adição de grupos. Para a simulação foram usados os dados da correlação de (Perry *et al.*, 1949) para o óleo de soja, os quais são mostrados na Fig. 36a. Com os dados de p_v para óleo de soja e do diesel, é obtida $p_{v,m}$ em função da temperatura para a mistura 80s20d, de acordo com o mostrado na Fig. 36a, usando a fração molar (X_i) e a seguinte equação: $p = \sum X_i p_i$.

Para o diesel a entalpia de vaporização (ΔH_v) é calculada em função da temperatura por (Sazhin *et al.*, 2005), e ao se fazer a comparação com os dados obtidos da base de dados de *Converge CFD*, estes não apresentam diferença significativa. Por tanto para a simulação foram usados os dados de calor de vaporização para diesel da base de dados de *Converge CFD*, mostrados na Fig. 36b.

A entalpia de vaporização para o óleo soja em função da temperatura de acordo com (Perry *et al.*, 1949) e (Hammond *et*

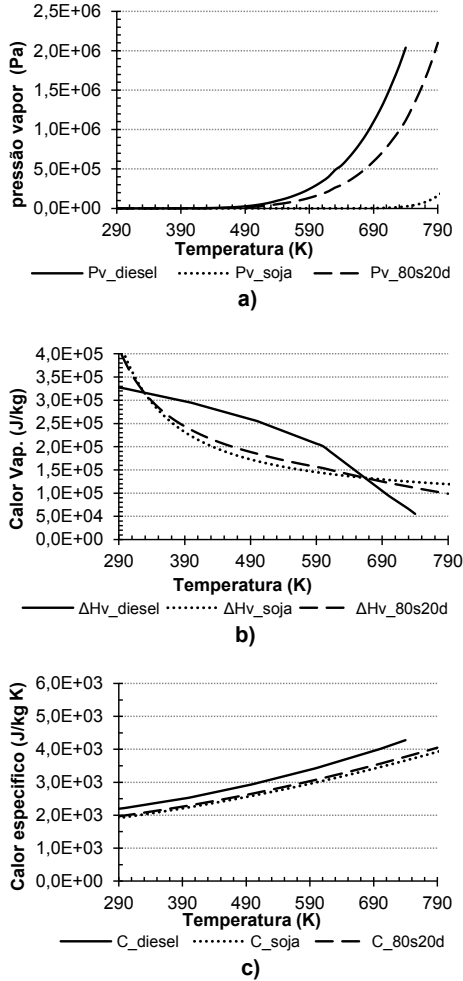


Figura 36 – Propriedades dos combustíveis em função de T. a) Pressão de vapor, b) Entalpia de vaporização, c) Calor específico. (Fonte: autor)

al., 2005) pode ser calculada usando a equação de Antoine ($\log p = A + B/(C + T)$). Os dados obtidos por (Perry *et al.*, 1949), foram correlacionados com a equação de Antoine obtendo os parâmetros A , B e C . Depois usando a equação de Clausius-Clapeyron ($dp/dT = \Delta\bar{H}_{vp}/RT^2$) e a equação de Antoine, são igualados os

termos dp/dT das duas equações para obter o calor de vaporização em função da temperatura. Os dados obtidos para o óleo de soja são mostrados na Fig. 36b. Com os dados de ΔH_v para óleo de soja e do diesel, é obtida $\Delta H_{v,m}$ em função da temperatura para a mistura 80s20d, de acordo com o mostrado na Fig. 36b, usando a fração molar na seguinte equação: $\Delta H_v = \sum X_i \Delta H_{v,i}$.

O calor específico (C) para o diesel obtido da base de dados do *Converge CFD* em função da temperatura, foi comparado de forma gráfica com os dados obtidos por (Sazhin *et al.*, 2005) os quais foram correlacionados com uma equação polinomial, e é possível ver que os dados estão próximos e apresentando a mesma tendência. Na simulação foram usados os dados da base de dados de *Converge CFD*. Para o óleo de soja foram feitas diferentes correlações baseadas em dados experimentais por (Kasprzycka-Guttman, 1991), (Rojas *et al.*, 2013) e (Clark *et al.*, 1946), estes dados ao ser comparados graficamente não apresentam diferenças significativas, apresentando também a mesma tendência do C do diesel. Para a simulação foram usados os dados de (Rojas *et al.*, 2013). O calor específico para o diesel e para o óleo soja são mostrados na Fig. 36c. Com os dados de C para óleo de soja e do diesel, é obtida C_m em função da temperatura para a mistura 80s20d, de acordo com o mostrado na Fig. 36c, usando a fração molar na seguinte equação: $C = \sum X_i C_i$.

4.2.7 Trabalhos de simulação numérica de spray

Os dados da simulação apresentada no capítulo 3, feita até 20° antes do PMS (admissão de ar e compressão), serviram como ponto de partida para as simulações de spray apresentadas neste capítulo. A simulação da injeção de combustível e subsequente combustão precisa dos campos de velocidade, pressão, temperatura e de modelos de quebra primária, quebra secundária, evaporação, interação de gotas, dispersão, interação com a parede, e requer da modelagem de fenômenos, principalmente no referente à gota.

Numa análise experimental e numérica usando um motor diesel de injeção mecânica, feita por (Lesnik *et al.*, 2013), foi usado na simulação do desenvolvimento do spray de combustível o *AVL Fire 3D* com modelo de turbulência $k - \varepsilon$ e abordagem Lagrangiana/Euleriana, e com *AVL Boost* foi simulada a influência do biodiesel nas condições de operação e formação de poluentes. A investigação foi focada em três partes: influência nas características de injeção, influência na formação do spray e influência no desempenho e formação de poluentes usando como combustíveis diesel

e biodiesel (colza). Para a quebra primária foi usado o modelo de instabilidade KH para descrever o tamanho das gotas e velocidade perto do injetor. O modelo de quebra secundária usado foi o KH. Como resultados foram obtidos gráficos de pressão versus ângulo de manivela, consumo de combustível versus velocidade e imagens da forma do spray. Também foram obtidos dados de torque, temperatura, CO, NOx versus velocidade do motor. A conclusão geral é que o biodiesel pode ser usado como combustível alternativo em motores de trabalho pesado.

Para óleo vegetal puro (SVO de *Jatropha*) (Agarwal *et al.*, 2013) fizeram um estudo experimental comparativo dos parâmetros macroscópicos do spray de SVO, de biodiesel e misturas deles numa câmara a volume constante, encontrando que o SVO e o biodiesel tem alta penetração de spray, grande ângulo e área de spray.

As características de spray e atomização de combustível diesel e biodiesel de óleo de cozinha usado, foram analisadas de forma experimental por (Chen *et al.*, 2013) com a técnica de imagem de alta velocidade. Os parâmetros comparados são diâmetro da gota, distribuição de partículas, penetração de spray, ângulo de spray, obtendo como resultado que as características do jato de biodiesel são diferentes às do diesel, com maior penetração e maior diâmetro de gota.

Igualmente uma análise experimental das características de spray de combustível diesel e biodiesel de palma foi feito por (Kuti *et al.*, 2013) numa câmara a volume constante, caracterizando os processos de evaporação e químluminescência (OH) para obter a ignição. Os resultados indicaram que o diâmetro do furo tem relação com a aparição da região de ignição, assim como a relação da pressão de injeção e o atraso da ignição.

A caracterização de spray de SVO de *jatropha* e *pongamia* foi feita de forma experimental para altas pressões de injeção por (Deshmukh *et al.*, 2012), e os resultados mostram que tem atomização pobre e são observados núcleos de líquido intactos.

O spray de n-dodecano foi simulado de forma multidimensional no *Converge CFD* usando LES, por (Senecal *et al.*, 2013) com o objetivo de analisar a evaporação com diferentes sub-modelos para o spray. A quebra primária é modelada como o método blob e o mecanismo KH-RT para quebra secundária sem o uso de comprimento de quebra. Os resultados numéricos são comparados com dados experimentais de SANDIA, obtendo resultados similares em penetração de líquido e penetração de vapor.

Na investigação experimental e numérica dos efeitos da taxa de injeção na combustão e emissões, realizada por (Ramirez *et al.*, 2012a), foram estudados os efeitos da pressão no cilindro. Experimentalmente foram obtidas imagens da combustão no cilindro e os dados foram usados para a validação da simulação 3D do ciclo total do motor. A simulação do spray de combustível e a combustão foram feitas usando abordagem Lagrangiana/Euleriana no *Converge CFD*. A fase gasosa foi descrita usando media de Favre das equações de Navier-Stokes com os modelos de turbulência $k - \varepsilon$ *RNG* e LES, os quais incluem termos fontes para efeitos da fase dispersa na turbulência da fase de gás. Para quebra secundária foram usados os modelos KH e RT. A colisão de gotas foi modelada com um algoritmo, e a evaporação de gota foi modelada baseada na correlação de Frossling. Um modelo cinético detalhado foi usado em SAGE, com n-Heptano como substituto de combustível, usando um mecanismo cinético de 42 espécies e 160 reações. Os resultados numéricos foram comparados com dados experimentais de pressão no cilindro e a taxa de liberação de calor.

A quebra primaria e combustão de spray foi analisada por (Som & Aggarwal, 2010), usando o modelo KH da quebra primaria e o modelo KH-ACT (modificado, incluindo os efeitos da cavitação e turbulência no interior do injetor). A simulação foi feita usando *Converge CFD*, com uma abordagem Lagrangiana/Euleriana. A fase gasosa foi descrita usando a media de Favre das equações de Navier-Stokes com o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ *RNG*. Para a modelagem do spray e combustão foi levada em conta a atomização, quebra, distorção da gota, arrasto, interação das gotas, evaporação, dispersão turbulenta e interação com a parede. Nos resultados foi observado que ao incluir turbulência e cavitação leva a gotas de tamanho menor, diminui a penetração e incrementa a dispersão radial do spray. As duas fases são acopladas através da troca de massa, quantidade de movimento e energia, representadas pelos termos fontes nas equações da fase gasosa. O combustível usado foi o n-heptano (C_7H_{16}), com um mecanismo cinético de 42 espécies e 168 reações.

Uma análise experimental e numérica das características de atomização de spray de biodiesel, foi feito por (Park *et al.*, 2009), onde foram analisadas as características macroscópicas do spray usando imagens obtidas num sistema de visualização e de medição de gotículas. Foi estudado o efeito da temperatura do combustível e do gás ambiente nas características do spray de biodiesel (éster metílico de óleo de soja-SME). Para a análise numérica foi usado

o programa *KIVA*, obtendo as características do spray de biodiesel pela inserção de propriedades do combustível, levando em conta a cavitação no injetor, modelo de evaporação, e o modelo de atomização de quebra primária (*WAVE*) baseado no crescimento das instabilidades *KH*, e como modelo secundário o mecanismo de quebra *RT*. Foi observado que a penetração do spray aumenta com o incremento da pressão de injeção e é pouco afetada pela variação da temperatura do combustível. Os resultados mostram que quando a temperatura do combustível é incrementada o *SMD* é incrementado experimental e analiticamente.

Os métodos experimentais e numéricos também foram usados por (Gao *et al.*, 2009), para o estudo das características do spray de biodiesel de óleo não comestível. Foram feitas medições da penetração do spray, ângulo de cone e velocidade do spray para diferentes razões de combustível. Os resultados experimentais mostram que para mistura com razão de biodiesel incrementada, a penetração do spray e a velocidade são incrementadas, mas o ângulo de cone diminui. A simulação foi feita usando *Star-CD*. Os resultados da simulação mostram que o *SMD* da mistura 80s20d de combustível foi maior que do diesel, e o spray foi mais concentrado, devido à alta viscosidade e tensão superficial do biodiesel. Foram investigadas as características do spray de três diferentes biodiesel (óleo de palma, óleo de fritura usado, óleo de jatrofa), em cinco valores de razão de mistura contendo 5%, 10%, 20%, 50% e 100% de biodiesel com 100% diesel.

Um modelo para simulação de atomização de spray de gasolina e diesel com um esquema dinâmico de refinamento de malha foi usado por (Kolakaluri, 2009), o qual tem a capacidade de usar os mesmos modelos e constantes sem ajustes para a simulação dos dois tipos de combustíveis, obtendo bons resultados quando comparado aos dados experimentais. A modelagem da combustão diesel foi feita usando o modelo de ignição *Shell* para simulação da autoignição, e para o spray implementa vários sub modelos incluindo escoamento no injetor, quebra primária e quebra secundária (modelo *KH/RT*). A ferramenta computacional utilizada foi o *KIVA-4* para a solução 3D das equações de Navier-Stokes, com implementação Lagrangiana/Euleriana. Os resultados da simulação mostram que o comprimento do líquido diminui com o aumento da massa específica do gás. Para a formação de fuligem foi usado o modelo de dois passos: formação e oxidação. Os resultados foram validados com dados experimentais de *SANDIA*, e mostram a variação tempo-

ral da distribuição de massa de fuligem em diferentes tempos depois da injeção. Também foram validados dados de pressão no cilindro, taxa de liberação de calor, emissões de fuligem e NOx. O modelo mostrou que pode ser usado para prever o processo de combustão e emissões com desempenho satisfatório.

Para a simulação de spray em motores diesel, (Elkotb, 1982) sugere um modelo do spray na câmara de combustão de um motor, baseado na combinação do modelo discreto da gota com um método tridimensional de previsão de escoamento de gás, onde a variação do diâmetro da gota, velocidade, transferência de calor à gota e força de arrasto são levadas em conta. Para a utilização do modelo foi determinada experimentalmente a distribuição do tamanho da gota e o diâmetro médio da gota.

Nesta revisão bibliográfica encontrou-se que têm sido reportadas na literatura simulações de evaporação e combustão de spray em motores de combustão interna de ignição por compressão usando combustíveis de tipo biodiesel, óleo diesel e suas misturas principalmente, e que são feitos trabalhos experimentais para a análise das características do spray de óleos vegetais. Simulações de spray de óleo vegetal *in-natura* em motores não foram encontradas na pesquisa bibliográfica aqui conduzida.

4.3 MODELAGEM E METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

A solução numérica das equações governantes do escoamento turbulento no motor a combustão interna, é feita usando um modelo RANS para a solução das equações de Navier-Stokes no software *Converge CFD*. O software *Converge CFD* utiliza o método de volumes finitos, com o qual são resolvidas a forma integral das equações de conservação. O motor simulado é descrito na seção 3.3.1, a Tabela 6 contém as especificações do motor, e na Fig. 9 é mostrada a geometria tridimensional total. Para a simulação de spray é usada somente a geometria do cilindro do motor, onde as fronteiras são o pistão, cilindro e cabeçote de acordo com a Fig. 37a.

O injetor tem cinco (5) furos, e os jatos resultantes são identificados na Fig. 37b, numerados desde o jato 0 até 4. Esta identificação dos jatos é usada nas diferentes figuras e imagens doravante no documento, com o objetivo de mostrar a qual jato correspondem os dados de que se faz referência.

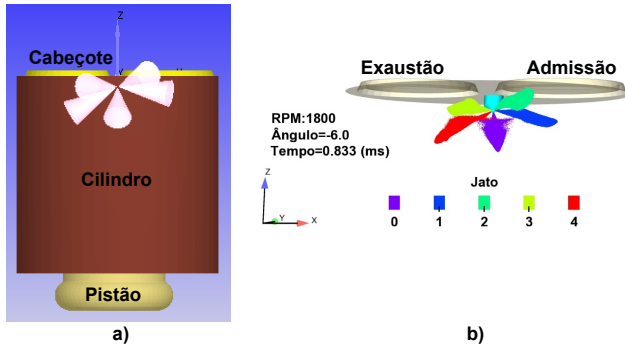


Figura 37 – a) Geometria tridimensional para simulação de spray e evaporação. b) Identificação dos cinco (5) jatos do injetor. (Fonte: autor)

4.3.1 Injeção de combustível

A injeção de combustível no cilindro é feita pelo injetor e a posição de cada um dos furos corresponde à posição real no cilindro do motor. Os furos do injetor têm as características descritas na seção 3.3.1. Com a informação do injetor, foi desenhado o injetor na geometria disponível do motor em *Converge Studio*, e são obtidas no desenho as coordenadas do vetor dos correspondentes jatos, Fig. 37b.

Usualmente a forma da taxa de injeção de combustível (*rate shape injection*), na câmara de combustão do motor, reduz a taxa de fluxo mássico no início da injeção. Isto reduz a quantidade de combustível que é misturado com ar e queimado na fase inicial, e então leva como consequência uma baixa taxa de liberação de calor e baixas temperaturas locais, se refletindo em baixas emissões de NOx. Para a simulação do spray do motor, é tomada uma forma da taxa de injeção tipo chapéu em toda a faixa de injeção.

A bomba de injeção usada pelo motor Yanmar é uma bomba marca Bosch PFR, a qual é apropriada para funcionamento com óleos viscosos, suportando desta forma o uso de óleo de soja. O êmbolo da bomba é acionado por médio da árvore de cames, a qual é assimétrica. Para propiciar o rápido corte da injeção, é aproveitada a zona central do came onde a velocidade de elevação é grande, e a injeção termina antes que a velocidade de elevação chegue ate seu valor máximo, respeitando em cada processo de injeção uma

distância de segurança de 0,3 mm. Medindo a elevação onde ocorre o final da injeção, o ponto corresponde a um ângulo de manivela de $375,3^\circ$, ou seja que a injeção termina $15,3^\circ$ depois do PMS. Na simulação numérica é imposto que a injeção termina 15° depois do PMS. O ângulo de manivela no qual ocorre o início de injeção, de acordo com a metodologia descrita em (Reddy *et al.*, 1993), usada para o análise de dados experimentais de pressão no cilindro para as velocidades de 1800 rpm e 2100 rpm, corresponde a 15° antes do PMS.

A quantidade de massa injetada por cada ciclo do motor é obtida de forma experimental, na bancada do motor Yanmar para as velocidades às quais são feitas as simulações, obtendo para cada ciclo as seguintes quantidades de combustível: $m_{d1800} = 68,09$ mg, $m_{d2100} = 66,40$ mg, $m_{m1800} = 70,94$ mg e $m_{m2100} = 67,43$ mg (o subscrito d denota o diesel e o subscrito m denota a mistura 80s20d).

O combustível diesel é levado à bomba de injeção à temperatura ambiente, mas de acordo com (Wagner & Peterson, 1982), o combustível sofre aquecimento até o momento da injeção. A importância da temperatura do injetor não é mencionada em muitos trabalhos, mas pode ter relevância na temperatura final de injeção de combustível (saída do injetor). É considerado que a temperatura do combustível é influenciada pela temperatura do injetor principalmente, de acordo com (Payri *et al.*, 2012). Para considerar a mudança de temperatura do combustível desde a entrada na bomba de injeção até a saída do injetor, foi utilizada a análise de (Byatt-Smith *et al.*, 1996) para condução de calor na região anular desde o injetor e a agulha até o combustível, podendo ser estimado o aumento de temperatura no combustível (ΔT_f) pela seguinte equação

$$\Delta T_f = \frac{\sqrt{t_c}}{\pi} \frac{\sqrt{\alpha_f}}{2(r_o - r_i)} \Delta T_s, \quad (4.91)$$

onde t_c é o tempo de residência do combustível no injetor em cada ciclo, $2(r_o - r_i)$ é o diâmetro interno do furo, α_f é a difusibilidade térmica do combustível, ΔT_s é a diferença de temperatura entre a parede externa do injetor e a temperatura inicial do combustível.

Nos testes experimentais a temperatura inicial do combustível diesel foi de 25°C e a mistura 80s20d foi aquecida até a temperatura de 85°C , mas para conhecer o comportamento do spray da mistura 80s20d também foi simulado o spray de mistura 80s20d a 25°C . A temperatura da parede do injetor é obtida com a simulação

de transferência de calor no motor, como temperatura média na região anular do injetor onde permanece o combustível em cada ciclo, com um valor de 470,75 K. Desta forma é obtido o incremento da temperatura para o combustível (ΔT_f) nas diferentes condições de operação do motor.

Tabela 10 – Temperatura do combustível. (Fonte: Autor)

| Simulação | Tipo de combustível/rpm | Temperatura inicial [K] | Aumento de Temperatura [K] | Temperatura de injeção [K] |
|-----------|-------------------------|-------------------------|----------------------------|----------------------------|
| d1800 | Diesel /1800rpm | 298,0 | 10,3 | 308,4 |
| d2100 | Diesel /2100rpm | 298,0 | 9,5 | 307,7 |
| m1800-1 | Mistura 80s20d /1800rpm | 298,0 | 10,3 | 308,4 |
| m2100-1 | Mistura 80s20d /2100rpm | 298,0 | 9,5 | 307,7 |
| m1800-2 | Mistura 80s20d /1800rpm | 358,0 | 7,3 | 365,5 |
| m2100-2 | Mistura 80s20d /2100rpm | 358,0 | 6,8 | 364,9 |

Na Tabela 10 se mostra a relação da temperatura inicial do combustível, e pode se ver a temperatura final de injeção do combustível para cada velocidade do motor e para cada combustível, sendo em total seis simulações de spray.

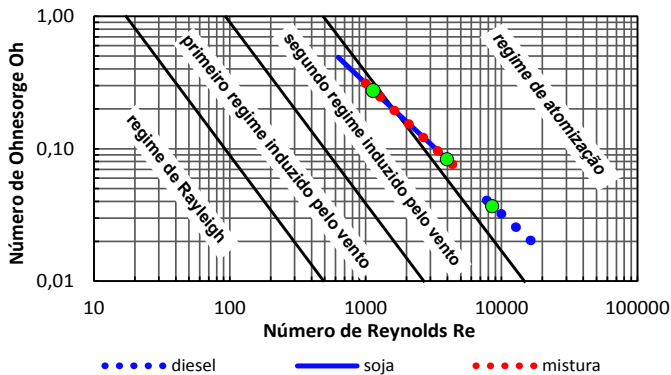


Figura 38 – Diagrama de Ohnesorge para os combustíveis em 1800 rpm. (Fonte: autor)

Usando como referência as temperaturas de injeção de combustível foi analisado o regime de quebra do jato líquido para o diesel, óleo de soja e mistura 80s20d. Como descrito na seção 4.2.1, o modo de desintegração do jato líquido pode ser classificado em

quatro regimes, sendo o regime de atomização aquele de importância para o spray em motor de ignição por compressão. Os três combustíveis (diesel, óleo de soja e mistura 80s20d) são analisados na faixa de temperatura de 300 K até 370 K usando as Equações (4.7), (4.8) e (4.9) para ver o comportamento dos combustíveis em relação à temperatura no diagrama de Ohnesorge. Os resultados são mostrados na Fig. 38 onde os menores valores de número de Re corresponde à menor temperatura para cada um dos combustíveis, e pode se ver que na faixa de temperatura dada, o combustível diesel atinge o regime de atomização, mas o óleo de soja e a mistura 80s20d precisam de aquecimento para atingir o regime de atomização. A mistura 80s20d sem aquecimento antes da injeção está no limite entre o segundo regime induzido pelo vento e regime de atomização. Os pontos verdes correspondem ao ponto de injeção para cada uma das simulações (uma para diesel e duas para a mistura 80s20d), na velocidade de 1800 rpm.

O coeficiente de descarga (C_D) no injetor é um fator importante no processo de injeção, e de acordo com (Lefebvre, 1989), pode ser obtido com a seguinte equação

$$\frac{1}{C_D} = \frac{1}{C_{Dmax}} + \frac{20}{Re} \left(1 + 2,25 \frac{l_o}{d_o} \right), \quad (4.92)$$

onde $C_{Dmax} = 0,827 - 0,0085(l_o/d_o)$, l_o é o comprimento do furo do injetor, d_o é diâmetro do furo, e estes valores são obtidos das tomografias do injetor para um valor de 2,1 da razão l_o/d_o . De acordo com a quantidade de combustível injetado por cada ciclo, considerando os 5 furos do injetor e as propriedades do combustível na temperatura de injeção, é obtido um coeficiente de descarga para o diesel de 0,8 e para a mistura 80s20d de 0,8, e estes valores são usados para o injetor na simulação.

As propriedades dos combustíveis puros e da mistura 80s20d na temperatura de 308 K e 365 K são mostrados na Tabela 11.

Tabela 11 – Propriedades dos combustíveis na temperatura de injeção. (Fonte: Autor)

| Propriedade | Temperatura 308 K | | | Temperatura 365 K | | |
|---------------------------------------|-------------------|---------|---------|-------------------|---------|---------|
| | Diesel | Mistura | Soja | Diesel | Mistura | Soja |
| Massa específica [kg/m ³] | 822,4 | 890,8 | 908,3 | 785,3 | 853,6 | 871,7 |
| Viscosidade dinâmica [Pa.s] | 0,00289 | 0,02182 | 0,03482 | 0,00128 | 0,00586 | 0,00837 |
| Tensão superficial [N/m] | 0,02706 | 0,03041 | 0,03181 | 0,02302 | 0,02590 | 0,02715 |
| Condutividade térmica [W/m K] | 0,11496 | 0,15475 | 0,16486 | 0,10796 | 0,14676 | 0,15661 |

4.3.2 Características do método numérico

A simulação de spray incluindo evaporação, para os combustíveis diesel e mistura 80s20d é feita para as velocidades de 1800 rpm e 2100 rpm. Para a mistura 80s20d são feitas duas simulações, cada uma com diferentes temperaturas de injeção de combustível, como é relacionado na Tabela 10. As velocidades do motor escolhidas para a simulação correspondem à máxima potência do motor (2100 rpm), e velocidade mínima na qual pode ser operado o motor nos testes experimentais, aplicando a máxima carga com mistura 80s20d (1800 rpm).

A simulação de spray inicia em -20° (20° antes do PMS) e termina ao final do curso de expansão em 120° do ângulo de manivela, com o objetivo de evoluir até a maior parte do curso de potência que ocorre entre 0° e 180° . A condição inicial de variáveis é a resposta numérica da simulação feita no capítulo 3, a qual é tomada como ponto de partida para as simulações de spray (injeção), vaporização e combustão.

É considerado spray com evaporação e sem combustão para obter principalmente as características do spray, e é usada somente a região do cilindro para diminuir a quantidade de volume, levando em conta que na faixa de tempo de simulação não são ativadas as válvulas do motor.

Na simulação é usado o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ RNG, e considerando escoamento compressível é usada a equação de estado de Redlich-Kwong (Equação (3.7)). Para o acoplamento pressão-velocidade foi usado o algoritmo PISO, (Versteeg & Malalasekera, 1995), e para a solução da pressão é usado o método de *multigrid*.

A função de interpolação no tempo é feita com uma formulação totalmente implícita, e no *Converge CFD* é usado como tempo o ângulo de manivela em graus, onde o intervalo de tempo é variável usando um valor mínimo e um valor máximo de acordo com a Tabela 7.

A fase dispersa ou líquido injetado é descrita com abordagem Lagrangiana e a fase gasosa é descrita pela abordagem Euleriana na solução das equações de Navier-Stokes. Na modelagem de spray é usado: modelo *blob* para quebra primária, modelo KH-RT para quebra secundária incluindo a formação de novas parcelas filhas e sem comprimento de quebra, modelo de dispersão turbulenta de O'Rourke, evaporação de gota com o modelo de Frossling para mudança de tamanho de gota e modelo de Ranz-Marshall para transfe-

rência de calor na gota, modelo de colisão *No Time Counter - NTC* (com coalescência, separação de alongamento e separação reflexiva), modelo dinâmico de arrasto, interação com a parede incluindo rebote e deslize, e finalmente coeficiente de descarga dinâmico. As duas fases (dispersa e gasosa) são acopladas através da troca de massa, quantidade de movimento e energia, representadas pelos termos fontes nas equações da fase gasosa. De acordo com as análises feitas por (Zhou *et al.*, 2015), os resultados mostram que o modelo de quebra KH-RT é uma boa escolha para spray do líquido, ao ser comparados os efeitos de diferentes modelos de quebra em atomização e evaporação de spray, e para o modelo de quebra KH, a constante B_1 do modelo apresenta boa concordância na simulação de combustível diesel para valores de 5 a 7, (Senecal *et al.*, 2013).

A dependência de malha para parâmetros de spray de combustível é verificada usando malha base de 2,5 mm, 1,2 mm e 1,0 mm com Adaptive Mesh Refinement-AMR de escala 2 no cilindro e *fixed embedding* de escala 3 para cada jato de combustível. A análise é feita para combustível diesel com o motor em 1800 rpm. Os parâmetros analisados são a penetração do líquido e a penetração do vapor conforme definidos na próxima seção.

A penetração de líquido do jato 0 é calculada em função do ângulo de manivela para 3 dimensões da malha. Na Fig. 39a observa-se que a penetração calculada para a malha com 2,5 mm é aproximadamente 3% menor. Os resultados com malha 1,2 mm e 1,0 mm são semelhantes. Então, conclui-se que a malha de 1,2 mm é suficiente para captar os fenômenos que resultam na penetração de líquido.

Para a penetração de vapor, mostrada na Fig. 39b), os resultados com malha de 2,5 mm apresentam oscilações que diferem dos resultados das outras duas malhas. Novamente, conclui-se que a malha com espaçamento de 1,2 mm é suficiente para captar os fenômenos que influenciam a penetração de vapor.

O número de volumes no domínio computacional foi verificado no ângulo de 10° antes do PMS tendo o combustível sido injetado a 15° antes de PMS. O número de volumes de controle aumenta de 342.000 volumes para a malha de 2,5 mm, para 2.625.000 volumes para a malha de 1,2 mm e 4.385.000 volumes para a malha de 1,0 mm. O tempo computacional aumenta em 5 vezes e 11 vezes, respectivamente. Assim, com o objetivo de obter a melhor precisão nos valores dos parâmetros de spray e atomização e considerando uma redução no tempo computacional, é selecionada a malha base de 1,2 mm.

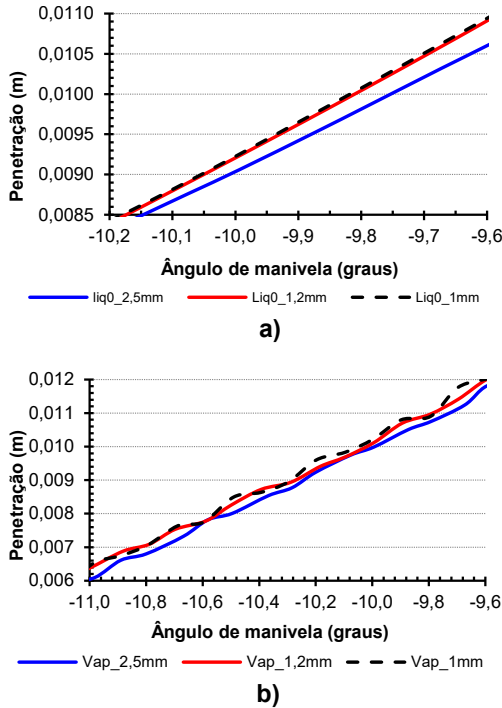


Figura 39 – a) Penetração de líquido, b) Penetração de vapor em função do ângulo de manivela para o motor em 1800 rpm e três tamanhos de malha base. (Fonte: autor)

Os parâmetros de malha usados na simulação, de acordo ao *Converge CFD* foram os seguintes: foi definida uma malha base de 1,2 mm para todos os eixos, e com esta malha base para cada um dos jatos de combustível foi feito um refinamento de malha de 0,15 mm usando *fixed embedding* iniciando em -15° até 30° . Levando em conta as variações de velocidade e de temperatura em toda a geometria é usada a metodologia de refinamento de malha *Adaptive Mesh Refinement - AMR* baseado nas flutuações de estas duas variáveis para refinar a malha a 0,3 mm quando as variações atingem um valor máximo estabelecido, desde 30° até 55° . Desde 55° até 70° é usado *fixed embedding* em todo o cilindro para refinamento de 0,6 mm. Na parede do cilindro, do pistão e do cabeçote é feito um refinamento de malha até 0,6 mm usando *fixed embedding* que inicia em -14° até 55° .

A metodologia *fixed embedding* foi usada para melhorar a resolução da malha de forma localizada em uma secção crítica do domínio, em tanto que nas outras secções menos críticas foi usada uma malha grosseira. O *AMR* é usado quando é difícil definir a prioridade onde *fixed embedding* deve ser feita. *Converge CFD* determina a magnitude do campo sub-malha para definir onde a melhora tem que ser feita, (Senecal *et al.*, 2012).

Usando o computador descrito na secção 3.3.2 e simulando em paralelo o tempo médio de cada simulação de spray e atomização foi de 104,8 h.

4.3.3 Condições de contorno do modelo

Para a simulação de spray tem-se como fronteira móvel o pistão. O movimento requer que a geometria e a malha se adaptem com o tempo e por tanto em *Converge CFD* o pistão é definido como fronteira com movimento de pistão e o software internamente gera uma tabela da posição do pistão.

A quantidade de combustível injetada em cada simulação é a descrita na secção 4.3.1.

As fronteiras que formam a geometria são as paredes do cilindro, do pistão e do cabeçote. Para cada uma das paredes do sistema, a temperatura que foi usada como condição de contorno corresponde à temperatura média do componente sólido obtidas como descrito na secção 3.3.3.

4.3.4 Condições iniciais do modelo

Para os gases no cilindro, o estado inicial para pressão, temperatura, velocidade, energia cinética turbulenta, taxa de dissipação de energia cinética turbulenta e massa das espécies, são tomados os valores obtidos na simulação de escoamento em -20° , os quais foram previamente armazenados e usados como condição inicial na simulação de spray.

4.4 RESULTADOS E ANÁLISE DE SPRAY

As diferentes características do spray e da evaporação do combustível são apresentadas, descrevendo cada uma delas e seu comportamento no interior do cilindro, levando em conta que no processo são usados dois tipos de combustíveis com propriedades termofísi-

cas diferentes. Em cada um dos casos simulados são destacadas as principais diferenças entre o spray do diesel e da mistura 80s20d.

A notação especificando o tipo de combustível e a velocidade do motor para cada simulação é relacionada na Tabela 10, levando em conta a notação para as simulações da mistura 80s20d nas duas temperaturas de injeção.

4.4.1 Penetração de spray líquido e de vapor de combustível

A penetração do líquido é definida como sendo o comprimento axial que abrange 98% da massa de combustível líquido injetado. A penetração de vapor é definida como sendo o máximo comprimento desde o injetor até onde há uma fração de massa de combustível de 0,1%, (Richards *et al.*, 2016).

Com a identificação para os jatos do injetor da Fig. 37b, os jatos 0, 1 e 4 saem do injetor em direção da coroa do pistão, e os jatos 2 e 3 saem em direção do cabeçote atingindo as válvulas de admissão e exaustão respectivamente. O jato 0 penetra na taça do pistão e devido a sua inclinação atinge a superfície interna mais afastado da taça do pistão, seguidamente o jato 2 que atinge de forma deslizante a válvula de admissão continuando para a região de *squish* e o jato 4 atinge a superfície interna mais longe da taça do pistão, nessa ordem ao longo do tempo. Os jatos 1 e 3 quase ao mesmo tempo atingem o pistão, já que o jato 3 que sai na direção da válvula de exaustão é desviado pelo escoamento turbulento para o interior da taça do pistão. Nas seguintes figuras, foram usados dados dos jatos 0 e 2, para a análise da penetração do líquido, pelo fato de que o jato 0 é o que atinge mais rápido o pistão e o jato 2 atinge a válvula de admissão de forma deslizante e em seguida penetra rápido no volume entre o cabeçote e o pistão.

A Fig. 40a mostra a penetração do spray de diesel e da mistura 80s20d na velocidade de 1800 rpm, e a Fig. 40b mostra a penetração de spray na velocidade de 2100 rpm. Para cada simulação nestas figuras é adicionada a notação LiqX, onde X denota o número do jato, e o número 1 e 2 ao final representa a simulação com mistura não aquecida e aquecida respectivamente (Tabela 10).

Na Fig. 40a pode se ver que a penetração do líquido desde o início da injeção até 0,2 ms é quase nula já que a velocidade de injeção é baixa em esta faixa como mostra a Fig. 41b. Depois de 0,2 ms, a penetração do líquido tem uma taxa de aumento constante até

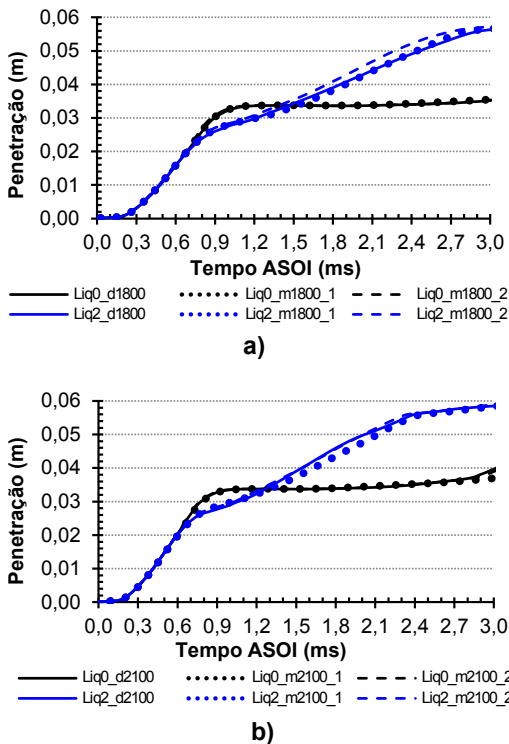


Figura 40 – Penetração de spray em função do tempo ASOI. a) em 1800 rpm, b) em 2100 rpm. Na notação LiqX, X é o número do jato, e o número 1 e 2 ao final representa a simulação com mistura não aquecida e aquecida respectivamente (Fonte: autor)

0,70 ms ASOI (Pelas siglas em inglês de *After the start of injection*) onde a penetração é de 20,0 mm aproximadamente para os jatos 0 e 2. O jato 2 apresenta maior penetração de líquido de combustível depois de 1,4 ms o qual é devido a que depois deste tempo o pistão inicia seu curso de expansão desde o PMS e este jato atinge a superfície da válvula de admissão, então o combustível líquido entra rapidamente no volume, cada vez maior, entre o cabeçote e o pistão, para o qual contribui o efeito *squish*.

Na Fig. 40b, a penetração do líquido para 2100 rpm tem taxa de aumento constante iniciando em 0,16 ms até 0,63 ms ASOI onde a penetração é de 21,0 mm aproximadamente para os jatos 0 e 2.

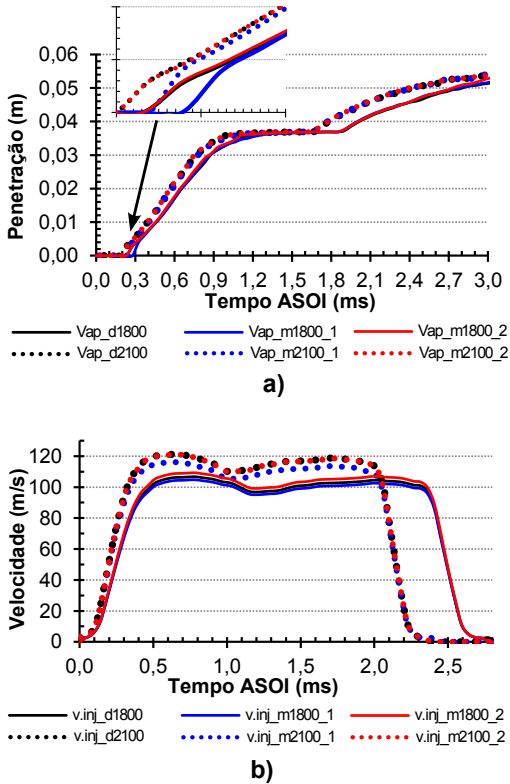


Figura 41 – a) Penetração de vapor jato 1 em função do tempo ASOI, b) Velocidade de injeção (Fonte: autor)

O crescimento linear no tempo de penetração na primeira fase ocorre na faixa de $0 < t < t_{quebra}$ onde a quebra não necessariamente ocorre quando o líquido deixa o injetor, para t_{quebra} sendo o tempo donde o jato líquido começa a se desintegrar e atinge um raio de gota estável, de acordo com o modelo KH. Esta primeira fase vai até onde o líquido que sai do injetor inicia a sua desintegração ($t = t_{quebra}$). Devido à pouca elevação da agulha do injetor e ao pequeno fluxo de massa de combustível no início da injeção, a velocidade é pequena como mostrado na Fig. 41 b, e então o primeiro jato que sai do injetor não quebra depois de deixar o injetor. Na segunda fase ($t > t_{quebra}$), a ponta do spray é formada de gotas, e a velocidade da ponta é mais pequena que na primeira fase. A ponta

do spray continua penetrando no gás devido às novas gotas com alta energia cinética.

O tempo de quebra para o modelo KH (Equação (4.43)) calculado com as propriedades do combustível na temperatura de injeção e a partir do momento no qual a velocidade de injeção atinge o valor máximo, é de 0,10 ms para 1800 rpm (não apresenta diferença significativa entre os três tipos de combustíveis) e é de 0,09 ms para 2100 rpm (não apresenta diferença significativa entre os três tipos de combustíveis).

A velocidade do jato líquido depende da velocidade de injeção, e como a velocidade de injeção é baixa no início e atinge a velocidade máxima em 0,60 ms ASOI para 1800 rpm e em 0,51 ms ASOI para 2100 rpm (Fig. 41b), o tempo de quebra depois do início da injeção é calculado como a soma do tempo onde o jato atingir a velocidade máxima e o tempo de quebra calculado a partir deste momento, obtendo: tempo de quebra de 0,70 ms em 1800 rpm e de 0,60 ms em 2100 rpm, o qual está de acordo com o final da primeira fase da penetração do líquido. A penetração do líquido em ($t > t_{quebra}$) é dominada pela aerodinâmica e/ou instabilidades KH.

Tabela 12 – Penetração do líquido em [mm] no jato 2 para diferentes tempos ASOI. (Fonte: Autor)

| Tempo ASOI [ms] | 1800 rpm | | | 2100 rpm | | |
|-----------------|----------|---------|---------|----------|---------|---------|
| | d1800 | m1800-1 | m1800-2 | d2100 | m2100-1 | m2100-2 |
| 0,20 | 0,87 | 0,86 | 0,89 | 1,26 | 1,22 | 1,24 |
| 0,65 | 18,07 | 18,18 | 18,66 | 22,39 | 22,19 | 22,70 |
| 0,90 | 25,97 | 26,45 | 27,00 | 27,79 | 28,65 | 28,40 |
| 2,00 | 42,42 | 42,05 | 44,81 | 49,67 | 47,51 | 49,81 |

A penetração é limitada pela rápida interação do spray com superfícies sólidas e pelos efeitos dinâmicos do escoamento no interior da câmara de combustão, o qual faz diferença em relação à simulação de spray e medições experimentais feitas por outros pesquisadores, os quais trabalham em ambiente quiescente e volume constante. A penetração do líquido é afetada pelas propriedades do combustível na sua fase líquida como são viscosidade, massa específica e tensão superficial. A penetração do líquido diminui ao aumentar o valor destas propriedades, por tanto a temperatura de injeção de combustível tem influência forte nesta característica do spray, e ao ter menor temperatura têm-se menores velocidades de injeção. A penetração do spray para as diferentes simulações é relacionada na Tabela 12, para o jato 2 em diferentes tempos depois

da injeção, e pode se ver que as simulações $m1800 - 1$ e $m2100 - 1$ têm os menores valores de penetração, pelo fato de que a mistura $80s20d$ não é aquecida e, portanto ρ , μ e σ são maiores que para os outros combustíveis. Mais uma consideração para a mistura $80s20d$ não aquecida é que a velocidade de injeção é menor e então isto influencia na penetração do líquido.

As propriedades da mistura $80s20d$ têm influência no desenvolvimento do spray em relação ao spray diesel, como pode ser observado na Fig. 42 onde são comparadas a forma de cada spray para dois tempos diferentes depois da injeção na mesma temperatura de injeção. A forma dos jatos diesel estão de acordo com o mostrado em experimentos e simulações de (Lesnik *et al.*, 2013). Na Fig. 42 pode se observar a diferença na dispersão do spray de acordo com a forma do spray, onde a dispersão é maior para o diesel do que para a mistura $80s20d$ quando são injetados na mesma temperatura, e a penetração é maior para o diesel, mas pode se ver que a mistura $80s20d$ tem um maior comprimento do jato que não é desintegrado o qual se deve a que este comprimento de líquido é menos influenciado pelos efeitos do gás circundante, que para o diesel.

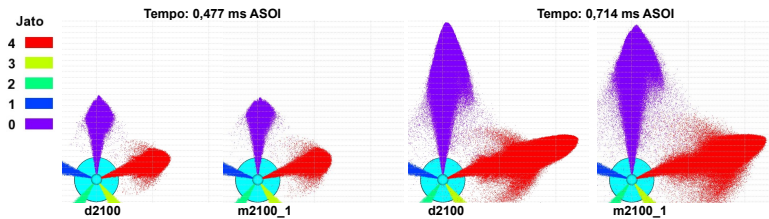


Figura 42 – Evolução da forma dos jatos no tempo, para 2100 rpm . (Fonte: autor)

De acordo com a teoria de dispersão turbulenta, os vórtices turbulentos do gás têm influência nas gotas de líquido retendo ou carregando-as dentro do vórtice quando o número de Stokes (St) é menor à unidade, e ao fazer a análise de número St (Equação (4.22)) em função do tempo depois da injeção para 1800 rpm , se obtém que para o diesel o número St inicia sendo maior à unidade, e diminui até ser menor da unidade ($St < 1, 0$) em $0,70\text{ ms ASOI}$, o que corresponde ao tempo depois do qual o spray é dominado pelos efeitos aerodinâmicos, como pode ver-se na Fig. 43. Para a mistura $80s20d$ nas duas temperaturas de injeção, o número de St não atinge valores menores á unidade mas apresenta o valor mínimo igualmente

em 0,70 ms ASOI. Os cálculos foram feitos com os valores médios das propriedades no cilindro do motor, incluindo o diâmetro médio Sauter (SMD), o qual tem influencia no resultado principalmente da mistura 80s20d já que é um valor médio em todo o domínio, e na realidade se tem gotas de diâmetros menores no spray que terá $St < 1$ e que serão influenciadas pelos vórtices do gás, como pode se ver na Fig. 49.

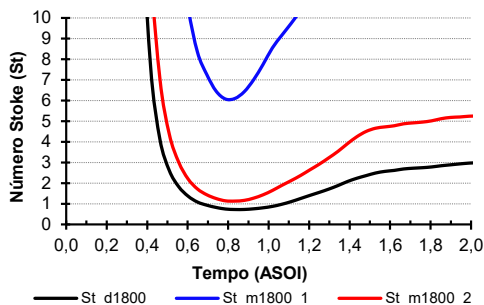


Figura 43 – Número de Stoke em função do tempo ASOI, para 1800 rpm. (Fonte: autor)

Nos primeiros 0,7 ms depois da injeção, a penetração do líquido não é muito influenciada pela velocidade do motor nem pelas propriedades do combustível, como pode se ver na Fig. 40a e 40b. Observa-se também que nesta faixa o comportamento do diesel é quase igual à mistura 80s20d, o que indica que nesta etapa de injeção a penetração é influenciada pelas condições termodinâmicas do gás circundante e pela taxa de injeção. Para o modelo de quebra secundário usado na simulação (KH-RT), ao comparado com outros modelos (por exemplo, KH-ACT) a penetração do líquido e do vapor, de acordo com (Som & Aggarwal, 2010), não apresentam diferenças significativas.

Quando são feitos testes em ambiente quiescente e a volume constante, a penetração de spray ao início aumenta até estabilizar-se em estado quase estável, e o comprimento que atinge o spray neste estado é chamado comprimento de líquido, mas ao contrario do que acontece com o líquido, o vapor continua sim aumentando sua penetração com o tempo e isto é o que contribui para a formação de mistura combustível-ar. No presente trabalho não é possível obter o estado quase estável, pero fato que se tem efeitos dinâmicos do escoamento e a interação do spray com as paredes.

A presença de *swirl* no interior do motor faz que o arrasto do ar desvie o spray na direção do *swirl*, e tenha menor penetração na câmara de combustão, como pode se evidenciar na Fig. 42. O arrasto produzido no spray pelo escoamento antes do PMS, é facilitado principalmente pelo *swirl*, o qual pode se ver na Fig. 19 onde na faixa de -10° a 0° a razão de *swirl* (R_s) tem o maior valor (2,1). A direção em que o arrasto é feito no spray (vide Figs. 42), concorda com a direção tangencial da velocidade no interior da taça do pistão mostrada na Fig. 21 um instante antes da injeção.

A penetração de vapor de combustível diesel para o motor em 1800 rpm tem uma taxa de aumento rápido inicial aproximadamente constante desde 0,24 ms até 0,90 ms ASOI para depois ser estabilizado em aproximadamente 37,0 mm de penetração e aumenta de novo depois de 1,85 ms, Fig. 41a. Para o motor em 2100 rpm a taxa de aumento rápido da penetração de vapor ocorre mais cedo devido à que a velocidade da injeção é maior, iniciando em 0,2 ms até 0,8 ms. Em 2100 rpm a penetração de vapor também é estabilizada em 37,0 mm e aumenta de novo depois de 1,7 ms, com o qual pode-se considerar que para maior velocidade do motor, a penetração de vapor é mais rápida. A mistura 80s20d que foi injetada à mesma temperatura que o diesel (linha e pontos da cor azul), tem penetração de vapor mais tardia que os outros combustíveis, o qual é devido a que esta mistura 80s20d tem uma taxa de evaporação menor, como pode se ver no detalhe feito para a Fig. 41a, onde para 1800 rpm inicia evaporação em 0,28 ms, e para 2100 rpm inicia em 0,24 ms.

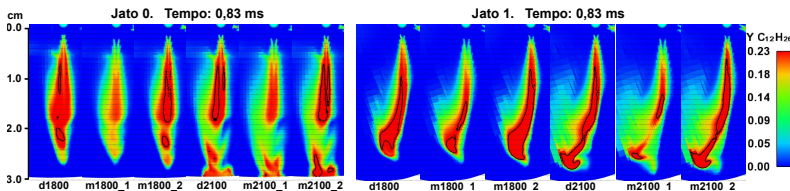


Figura 44 – Penetração de vapor no jato 0 e no jato 1 para 0,83 ms ASOI. (Fonte: autor)

A penetração de vapor, de acordo à Fig. 41a tem uma estabilidade em seu valor dependendo da velocidade do motor, devido a que todos os jatos atingem superfícies do cabeçote e do pistão, e a penetração de vapor de novo aumenta pelo fato que o pistão

inicia seu curso de expansão, e então os jatos têm maior volume e comprimento livre para continuar sua penetração até as paredes do cilindro e pistão.

Ao comparar a penetração de vapor de combustível diesel e da mistura $80s20d$, é possível ver na Fig. 44 para os jatos 0 e 1 em 0,83 ms ASOI, que a mistura $m1800 - 1$ e $m2100 - 1$ tem menor penetração, e esta mistura ao não ser aquecida antes da injeção em todos os casos apresenta menor fração de massa de vapor de combustível. Em esta figura é representada a fração de massa de combustível em vapor e a linha preta no interior dos jatos representa o contorno de fração de massa de combustível estequiométrica. A mistura $80s20d$ não aquecida no tempo representado, para o jato 0 não atinge a fração de massa estequiométrica e no jato 1 o contorno de fração de massa estequiométrica é pequeno.

4.4.2 Massa de combustível evaporado

O contorno de vapor de combustível quando o spray evapora pode ser visto na Fig. 44 para os jatos 0 e 1, em função da fração de massa, e as figuras mostram que a maior evaporação de combustível ocorre no centro do spray, devido a que as gotas de combustível injetado são agregadas no centro do spray. O início da evaporação de combustível é verificado com a aparição da espécie $C_{12}H_{26}$, e a evolução da evaporação do spray é mostrada nas Figs. 45 em função do ângulo de manivela. Nesta figura a evaporação de diesel e da mistura $80s20d$ aquecida (linhas da cor preto e vermelho) inicia aproximadamente em $-11,8^\circ$, e a mistura $80s20d$ não aquecida (linha da cor azul) inicia a evaporação em $-11,2^\circ$, o qual é ressaltado no detalhe feito na Fig. 45b.

A diferença na evaporação é devido a que a mistura $80s20d$ tem baixa volatilidade quando comparado com o diesel, e para a mistura $80s20d$ não aquecida a energia requerida para aquecer e evaporar o combustível em determinadas condições é mais alta que para um combustível que tem alta volatilidade. A mistura $80s20d$ que é aquecida antes da injeção nas duas velocidades do motor (linhas da cor vermelho) na Fig. 45, apresenta uma taxa de evaporação um pouco menor que o combustível diesel, com o qual pode se considerar que o aquecimento da mistura $80s20d$ contribui a melhorar a evaporação, quando comparado à mistura $80s20d$ sem aquecer que apresenta baixa evaporação mantendo maior quantidade de combustível líquido no curso de expansão. Depois do início da injeção, a taxa de evaporação aumenta e a massa de combustível evaporado

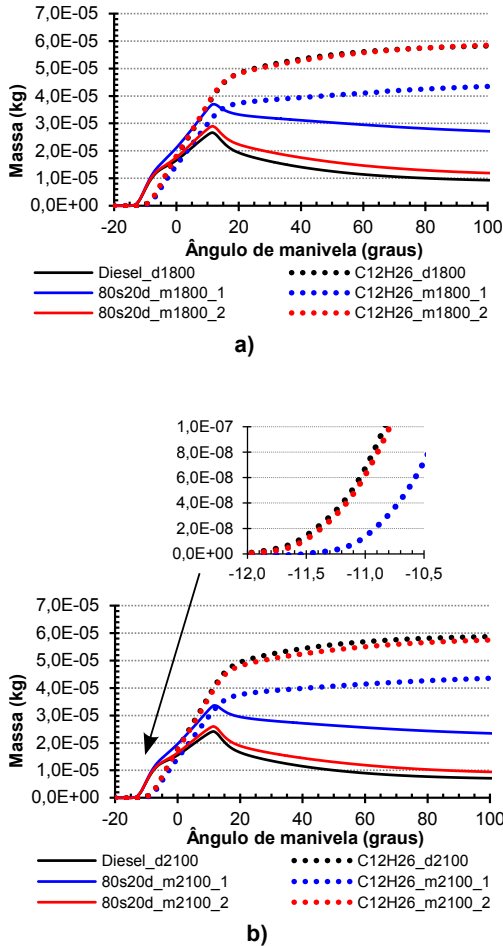
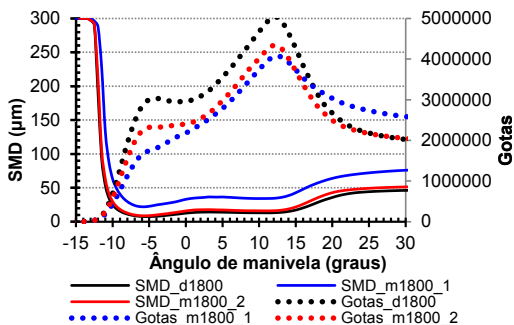


Figura 45 – Massa de combustível líquido e vapor em função do ângulo de manivela. a) em 1800 rpm, b) em 2100 rpm. (Fonte: autor)

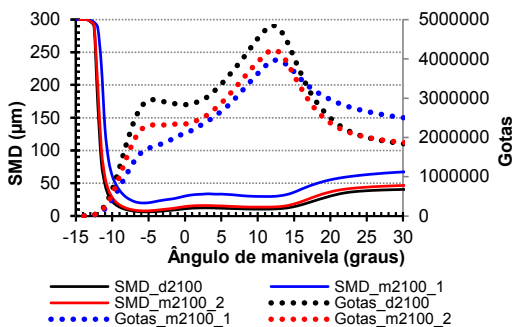
($C_{12}H_{26}$) aumenta constantemente.

As características de evaporação podem ser vistas a partir do número de gotas e tamanho de gotas das Figs. 46, onde o número de gotas aumenta imediatamente depois da injeção e começa a diminuir depois de 12° . A estimação do tamanho de gota é definida usando diâmetro médio Sauter (SMD). A diminuição do número de gotas é devido a que as gotas de menor tamanho são evaporadas ra-

pidamente e então as gotas que ainda permanecem são as de maior tamanho, por tanto na figura se tem um aumento do SMD depois da diminuição do número de gotas. O aumento do SMD em aproximadamente 15° não significa que as gotas estão aumentando seu tamanho, mas sim que é um resultado da diminuição da quantidade de gotas pequenas e então no volume permanecem as gotas grandes, o que significa que no volume detectado as gotas pequenas são evaporadas mais rápido que as gotas grandes.



a)



b)

Figura 46 – Diâmetro médio sauter e número de gotas em função do ângulo de manivela. a) 1800 rpm, b) 2100 rpm. (Fonte: autor)

Para a mistura 80s20d, sem aquecer (linha da cor azul), é obtido o maior tamanho de gota em toda a faixa, o qual é consistente com outras pesquisas feitas, e este maior tamanho de gota é consequência do alto valor de ρ , μ e σ , onde uma alta μ suprime as instabilidades requeridas para a quebra do jato e então atrasa a

atomização. O valor alto de ρ afeta adversamente a atomização e a alta σ dificulta a formação de gotas de combustível. Para a mistura 80s20d sem aquecer, a quantidade de gotas é menor que para os outros dois combustíveis até aproximadamente 15°, e depois de este ponto a quantidade de gotas é maior o qual é devido à baixa taxa de evaporação do combustível ao comparado com a maior evaporação que é obtida para o diesel e mistura 80s20d aquecida. Também é devido a que as gotas para o combustível não aquecido são de maior tamanho.

A mistura 80s20d aquecida (linha da cor vermelho), mostra uma taxa de evaporação ligeiramente inferior que o diesel, evidenciado mais claramente na Fig. 45, ao comparar a massa de combustível em vapor que é menor e a massa de combustível líquido que é maior que o diesel. O mesmo comportamento pode se ver na Fig. 46 onde para a mistura 80s20d aquecida o tamanho de gota é maior que no diesel, e por tanto a quantidade de gotas é menor na mistura 80s20d quando comparado ao diesel. Levando em conta as propriedades dos combustíveis em função da temperatura (Tabela 11), a mistura 80s20d aquecida tem valores de ρ , e σ muito perto ao combustível diesel (diferença de aproximadamente 4,0%), e então estas propriedades não influenciam no resultado obtido para o SMD maior na mistura 80s20d que no diesel, concluindo que a propriedade que apresenta maior diferença entre a mistura 80s20d aquecida e o diesel é a μ (aproximadamente do 100,0% maior na mistura 80s20d), por tanto é a propriedade que influi no tamanho de gota maior para a mistura 80s20d.

A Fig. 46 mostra o diâmetro SMD da gota e o número de gotas calculados em função do ângulo de manivela para os jatos 1 e 2. Observa-se que a evaporação e quebra ocorre muito rapidamente até -4° e que após esse valor, até 15°, o diâmetro permanece aproximadamente constante. O valor de SMD nessa região é comparado com as previsões da Eq. 4.1 na Tabela 13. Observa-se que os valores calculados pela correlação usando as propriedades no momento da injeção são próximos aos valores máximos obtidos numericamente.

4.4.3 Velocidade do spray

A velocidade de injeção de combustível é maior para o motor em 2100 rpm, devido ao menor tempo de injeção em relação ao motor em 1800 rpm. Em qualquer velocidade do motor, a mistura 80s20d quando não é aquecida antes da injeção, tem a menor velocidade de injeção quando comparada com a mistura 80s20d aquecida

Tabela 13 – Tamanho de gota numérico e tamanho obtido da correlação dada pela equação 4.1 para diesel e mistura 80s20d. (Fonte: Autor)

| Combustível | Numérico [μm] | Correlação Eq. 4.1 [μm] |
|----------------|----------------------------|--------------------------------------|
| d1800 | 9,0 até 14 | 19,0 |
| d2100 | 9,0 até 13,0 | 18,0 |
| m1800 aquecido | 10,1 até 17,8 | 20,4 |
| m2100 aquecido | 10,0 até 17,0 | 19,5 |

e com o diesel. Sendo esta de menor velocidade, é obtida menor penetração do líquido como mostrado na secção 4.4.1. Ao longo do jato, a velocidade média axial diminui desde o ponto perto do injetor ate o frente do spray. A diminuição da velocidade axial é devido ao aumento do atrito e à mistura entre o combustível injetado e o ar circundante.

O aumento da temperatura do combustível, no caso da mistura 80s20d, produz uma diminuição de ρ , μ e σ o qual influi na mistura de cada gota com o ar, e resulta em aumento da resistência para o movimento na direção axial e em diminuição mais rápida da velocidade da gota.

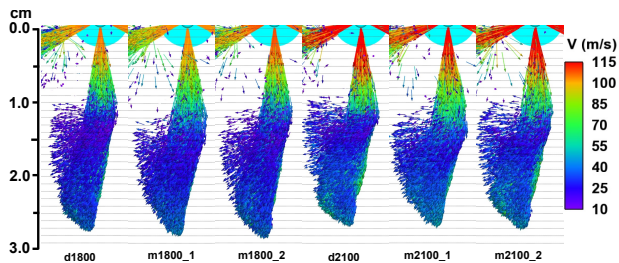


Figura 47 – Vetores de velocidade da gota para o jato 1 em $-6,2^\circ$. (Fonte: autor)

Na Fig. 47 é representado o vetor de velocidade da gota na superfície do spray, onde para a mistura 80s20d sem aquecer em 1800 rpm ($m1800 - 1$) pode se ver que a diminuição da velocidade na superfície e o desprendimento de gotas da superfície do spray é grande a partir de aproximadamente 14,0 mm desde o injetor, no entanto, para a mistura 80s20d aquecida ($m1800 - 2$) a diminuição da velocidade na superfície e o desprendimento de gotas da superfí-

cie do spray é grande a partir de aproximadamente 12,0 mm medido desde o injetor. Para o diesel (*d1800*), a diminuição da velocidade na superfície do spray ainda é mais perto do injetor (aproximadamente 10,0 mm desde o injetor), com o desprendimento de gotas da superfície do spray. Neste comportamento no spray dos diferentes combustíveis, é importante levar em conta que a velocidade de injeção da mistura *80s20d* sem aquecer é menor que a velocidade de injeção do diesel e da mistura *80s20d* aquecida, Tabela 14. Pode se concluir que as propriedades da mistura *80s20d* não aquecida, influenciam na velocidade e na dispersão do spray grandemente, da forma descrita. O comportamento na velocidade do spray descrito anteriormente é observado também na Fig. 47 para o spray na velocidade de 2100 rpm do motor.

Tabela 14 – Redução da velocidade axial do jato 1 em $-6,2^\circ$ para o diesel e para a mistura *80s20d*. (Fonte: Autor)

| Simulação | Velocidade de Injeção [m/s] | Penetração de spray [mm] | Comprimento axial de gotas com $v_{gota} > 0,9v_{injec}$ [mm] | Comprimento axial de gotas com $v_{gota} > 0,8v_{injec}$ [mm] | Porcentagem da penetração de spray de gotas com $v_{gota} > 0,8v_{injec}$ [%] |
|-----------|-----------------------------|--------------------------|---|---|---|
| d1800 | 106,3 | 25,5 | 7,5 | 15,5 | 60,8 |
| m1800-1 | 104,3 | 25,9 | 8,5 | 16,3 | 62,9 |
| m1800-2 | 108,9 | 26,4 | 8,2 | 16,2 | 61,4 |
| d2100 | 120,9 | 24,7 | 7,5 | 15,0 | 60,7 |
| m2100-1 | 115,7 | 24,6 | 8,2 | 15,3 | 62,2 |
| m2100-2 | 120,7 | 25,1 | 7,8 | 15,5 | 61,7 |

A velocidade axial no centro do spray apresenta um comportamento igual à velocidade na superfície, onde a redução de velocidade axial ocorre mais rápido para o diesel e para a mistura *80s20d* aquecida que para a mistura *80s20d* não aquecida. Na Tabela 14 para cada um dos combustíveis, é relacionado a velocidade de injeção e a penetração do spray em um ângulo de manivela de $-6,2^\circ$. Como a velocidade axial no centro de spray é menor longe do injetor até atingir velocidade de quase zero nas gotas mais na frente do spray, então as maiores velocidades estão perto do injetor (Fig. 47).

Com o objetivo de determinar para qual combustível a velocidade de spray é diminuída mais rápido em seu avanço para frente, é feita uma filtragem de forma gráfica do spray em função da velocidade de gota para o jato 1 nas diferentes simulações, com a condição de mostrar só as gotas que têm velocidade axial $v_{gota} > 0,9v_{injec}$, ou seja que não são mostradas as gotas que têm diminuído um 10% da velocidade, e então é obtido o comprimento axial até onde atingem

as gotas com $v_{gota} > 0,9v_{injec}$, e este comprimento é relacionado na Tabela 14. De igual forma é feita a filtragem da velocidade de gota no jato 1, com a restrição de mostrar as gotas com $v_{gota} > 0,8v_{injec}$, ou seja não mostra as gotas que têm diminuído um 20% da velocidade, e é obtido o comprimento axial até donde atingem as gotas com $v_{gota} > 0,8v_{injec}$, como mostrado na Fig. 48 e os dados de comprimento são relacionados na Tabela 14.

Levando em conta a velocidade de injeção para cada caso, na Tabela 14 é mostrado o comprimento axial medido desde o injetor até onde atingem gotas com $v_{gota} > 0,9v_{injec}$ e gotas com $v_{gota} > 0,8v_{injec}$. Os maiores comprimentos axiais correspondem à mistura 80s20d não aquecida.

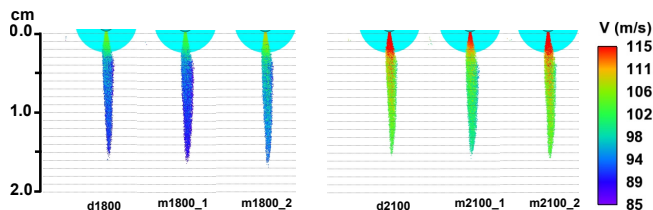


Figura 48 – Velocidade de gota dos combustíveis reduzida em 20% para o jato 1 em $-6,2^\circ$. (Fonte: autor)

Devido a que a velocidade de injeção influencia na penetração de spray e para cada caso simulado esta velocidade é diferente, então é levado em conta a penetração de spray no ângulo de $-6,2^\circ$ e comparada com o comprimento axial até onde atingem gotas com $v_{gota} > 0,8v_{injec}$, calculando a percentagem da penetração de spray onde isto ocorre. Na sexta coluna da Tabela 14, estão os dados de percentagem da penetração de spray para uma redução de 20% da velocidade axial, mostrando que a maior percentagem é para a mistura 80s20d sem aquecer nas duas velocidades do motor, ou seja que a redução da velocidade axial para esta mistura 80s20d ocorre mais pra frente do spray do que para os outros combustíveis.

Também pode se ver que a mistura 80s20d aquecida ($m1800-2$ e $m2100-2$), mesmo que suas propriedades foram diminuídas pelo aumento da temperatura, apresenta uma redução de 20% da velocidade mais pra frente que o diesel, o qual pode se atribuir a que a mistura 80s20d aquecida no momento da injeção ainda tem ρ maior em 4% e μ maior em 100% ao diesel, de acordo aos valores da Tabela 11.

Perto do injetor, a superfície no cone de spray é suave, mas quando vai mais para frente a superfície sofre distorção e pode se observar que o líquido desprende do spray na direção do ar circundante, devido à forte interação entre o spray e o gás o qual é bom para melhorar a entrada de gás no spray e fornecer a formação de mistura combustível-ar. A superfície do cone do spray é distorcida perto do injetor ou longe do injetor dependendo das propriedades do combustível, como pode se ver na Fig. 49. Para a mistura 80s20d, o cone do spray é distorcido mais longe do injetor que para o diesel.

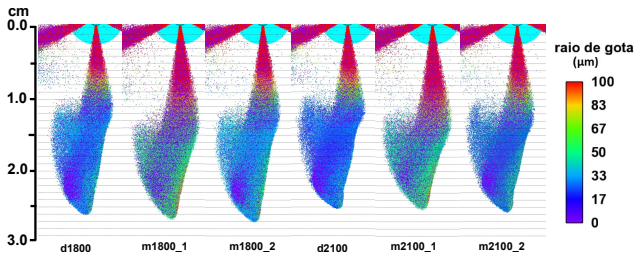


Figura 49 – Raio de gota para o jato 1 em $-6,2^\circ$ para o diesel e para a mistura 80s20d. (Fonte: autor)

A forma do spray mostra que perto do injetor para a mistura 80s20d sem aquecer, o núcleo de líquido permanece intacto para uma penetração maior que para os outros combustíveis, o qual indica que a viscosidade e a tensão superficial suprimem a desintegração do núcleo líquido. Também pode se ver que o raio de gota para a mistura 80s20d sem aquecer é maior na periferia do spray do que para os outros combustíveis. Quando a mistura 80s20d é aquecida ($m1800 - 2$ e $m2100 - 2$), o raio de gota na periferia do spray é maior do que para o diesel.

A dispersão do spray ocorre mais rápido para o combustível diesel, por tanto neste tipo de combustível são geradas gotas de menor tamanho mais rápido do que para a mistura 80s20d.

4.5 CONCLUSÕES

Foi realizada a simulação numérica da atomização de combustível no interior do cilindro usando dois tipos de combustíveis,

considerando o comportamento do escoamento no interior do cilindro e as propriedades termo físicas dos combustíveis.

Os combustíveis com valores baixos de ρ , μ e σ sofrem atomização mais rápida que os de alto valor nestas propriedades (na temperatura de injeção, o diesel apresenta valores para o número Re da ordem de 5000 e número de Ohnesorge da ordem de 0,06 na Fig. 38, e a mistura apresenta valores para o número Re da ordem de 300 e número de Ohnesorge da ordem de 0,65) devido à influência que estas propriedades têm na formação de forças intermoleculares no líquido e na formação de gotas, já que para o combustível com altos valores é produzida maior penetração com gotas maiores com a consequência de atomização e formação de mistura combustível-ar não muito boas.

A alta pressão de injeção resulta em maior velocidade de injeção, o que aumenta a penetração de spray, mas não garante que a dispersão seja melhor, devido a que tem mais propriedades que influenciam no comportamento do spray.

O alto ponto de ebulição da mistura 80s20d de combustível faz com que o combustível permaneça por mais tempo na fase líquida (0,04 ms a mais), quando comparada ao diesel, devido a que a mistura 80s20d é menos volátil.

O conhecimento dos mecanismos de atomização de spray de combustível é fundamental para obter resultados bem sucedidos em processos que seguem à atomização, como são a formação de mistura, combustão e formação de poluentes.

No centro do spray é obtida a maior fração de massa de vapor de combustível, devido a que a evaporação de combustível ocorre mais rápido nas gotas que estão no centro do spray.

Com aumento da temperatura do combustível no spray, o tamanho local das gotas é aumentado devido a que as gotas pequenas são evaporadas, e as gotas maiores permanecem no domínio computacional, com a consequência de que o SMD vai a ser maior no domínio.

As diferenças nas propriedades da mistura 80s20d e do diesel resultam em que para a mistura 80s20d é requerida maior pressão na injeção, e a alta pressão de injeção resulta em maior penetração de spray (1,05 vezes maior).

A penetração de spray diminui com o aumento da pressão na câmara de combustão, já que o líquido sofre maior resistência a escoar no gás e então é forçado a ir de forma radial a o eixo do jato.

Para a mistura 80s20d o SMD é maior e o spray é mais concentrado num cone não alterado pelo escoamento no interior do cilindro, pela ρ e σ que são maiores na mistura 80s20d quando comparado ao diesel.

Capítulo 5

ANÁLISE DA FORMAÇÃO DE MISTURA E COMBUSTÃO

No motor de combustão interna de ignição por compressão a injeção do combustível é feita quando o pistão está-se aproximando ao PMS no curso de compressão. A injeção é feita em alta pressão e esse processo gera gotículas de combustível a alta velocidade. A névoa de combustível interage termicamente com o ambiente da câmara de combustão, trocando calor e massa, inicia-se então a vaporização do combustível líquido, o qual vira gás para posteriormente se misturar com o ar circundante. Dependendo das condições de escoamento e difusão de espécies químicas, o combustível, já em fase gasosa, mistura-se com o oxigênio do ar e em algumas regiões são atingidas condições de mistura favoráveis à autoignição; mistura reagente dentro dos limites de inflamabilidade, temperatura e pressão por cima do valor mínimo para autoignitar. Desta forma, é iniciado o processo de combustão no cilindro e posteriormente as primeiras porções de combustível que entraram em combustão, irão aquecer ainda mais o ambiente, elevando a temperatura e a pressão, aumentando a interação térmica entre a névoa de gotículas de combustível ainda em fase líquida e o ambiente. Este aumento na interação térmica, gera melhores condições de vaporização do combustível, o processo continua já auto-sustentado pelas primeiras porções de combustível autoignitadas (chamas de pré-mistura). A atomização, vaporização, mistura de combustível-ar e combustão continuam até que todo o combustível é queimado, (Heywood, 1988).

5.1 INTRODUÇÃO

Na combustão de spray em motores de ignição por compressão estão presentes processos importantes e simultâneos como são a formação de spray, evaporação, ignição, combustão parcialmente misturada, combustão não pré-misturada, mudanças nas condições do ambiente como temperatura, pressão, composição e formação de poluentes.

Os processos em um motor de combustão interna de ignição

por compressão são multifísicos, multiescala, e precisam de acoplamento envolvendo turbulência. Dentro de estes processos as interações químicas e de turbulência com fronteiras em movimento, transferência de calor, toda a química da combustão na oxidação de combustível, formação e oxidação de fuligem faz que a simulação do motor seja uma tarefa complexa, levando à necessidade de usar modelos físicos que descrevem cada um destes processos.

A modelagem da autoignição, combustão e formação de emissões em um motor de ignição por compressão é complexa, e precisa envolver a cinética química com modelos fluidodinâmicos multidimensionais (CFD). Neste aspecto é importante levar em conta que o custo computacional é alto, devido a que cada célula dentro do domínio CFD é assumida que é um reator individual e então na simulação de combustão de spray uma grande porção de tempo computacional é dedicada à solução da cinética química detalhada. A simulação numérica com o uso de fluidodinâmica computacional de spray e combustão em motores diesel, é uma ferramenta importante na pesquisa e desenvolvimento dos processos que ocorrem no cilindro do motor.

Em motores diesel o tipo de combustível (óleo diesel, bio diesel, óleo vegetal ou misturas), afeta grandemente os processos físicos e químicos no cilindro, devido às diferentes propriedades físico-químicas dos combustíveis. A combustão de spray de óleo vegetal em motores de ignição por compressão tem sido pouco estudada de forma experimental e numérica, e por tanto são poucos os dados disponíveis para fazer uma comparação ou validação com os dados obtidos nas simulações no presente trabalho. O estudo da influência do óleo vegetal como combustível em motores diesel pode ser feito desde três pontos de vista, onde as propriedades do combustível influem: sistema de injeção, formação de spray e no desempenho do motor e formação de emissões.

Para um motor em condições de baixa carga, a maior parte da combustão é pré-misturada, e uma grande parte da energia química do combustível é liberada em uma pequena faixa de tempo perto ao PMS, aumentando a temperatura do cilindro. Este aumento da temperatura leva ao aumento da taxa de formação de NOx. Também, depois na fase de combustão não pré-misturada (ou de difusão) a taxa de formação de fuligem é aumentada pela combustão rica no núcleo do jato de spray onde a razão de equivalência está em valores entre 1,5 e 4,0, e a temperatura local varia entre 1400 e 2000 K.

Estudos feitos na área mostram que a ignição de combustíveis

tais como biodiesel tem um atraso de ignição significativa quando comparado com diesel, devido à baixa evaporação do líquido o qual tem baixa pressão de vapor.

Nos motores de combustão interna na fase de admissão, gerar um apropriado *swirl* no interior do cilindro é uma forma de melhorar a taxa de mistura de combustível-ar.

De acordo com a revisão bibliográfica, na abordagem Lagrangiana/Euleriana em motores para combustão de spray têm sido amplamente usados modelos de quebra de gota KH-RT. No presente estudo é usada também uma abordagem Lagrangiana/Euleriana.

Os resultados apresentados no desenvolvimento do documento estão baseados em uma simulação para cada caso, e por tanto não é possível indicar um intervalo de confiança nas análises.

5.1.1 Parâmetros teóricos da combustão

Os produtos da combustão a alta temperatura, não são misturas simples, já que as espécies dissociam-se produzindo espécies químicas minoritárias, por exemplo, os produtos de uma combustão ideal de um hidrocarboneto com ar são CO_2 , H_2O , O_2 e N_2 , mais a dissociação dessas espécies químicas e a reação entre produtos da dissociação podem resultar nas espécies químicas H_2 , OH , CO , H , O , N , NO entre outras.

Na combustão, as taxas das reações químicas determinam a taxa de combustão, e o conjunto de reações elementares necessárias para descrever uma reação de combustão é chamado de mecanismo cinético. Para uma reação global de um mol de combustível F com a mols de um oxidante (aOx) formando b mols de produtos de combustão (bPr) ($F + aOx \rightarrow bPr$), a taxa na qual o combustível é consumido a partir de medições experimentais é expressa como

$$\frac{d[X_F]}{dt} = -k_G(T)[X_F]^n[X_{O_x}]^m, \quad (5.1)$$

onde $[X_i]$ é a concentração molar de cada espécie química i na mistura, k_G é coeficiente de taxa global, m e n relacionam-se com a ordem da reação.

O uso de reações globais (ou mecanismos cinéticos globais) para expressar a cinética química, não proporciona uma base para o entendimento do que acontece quimicamente em um sistema, devido a que podem ocorrer muitos processos sequenciais envolvendo espécies químicas intermediárias. O conjunto de reações elementares necessárias para descrever uma reação global ou mecanismo de

cinética química, pode envolver poucas etapas ou muitas centenas de etapas. Num mecanismo de múltiplas etapas é preciso expressar as taxas líquidas de produção ou destruição para quaisquer espécie química que participa nas reações elementares, e este mecanismo pode ser descrito de forma compacta como, (Turns, 2000):

$$\sum_{j=1}^N \nu'_{ji} X_j \leftrightarrow \sum_{j=1}^N \nu''_{ji} X_j \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, L, \quad (5.2)$$

onde ν'_{ji} e ν''_{ji} são os coeficientes estequiométricos no lado da equação correspondente a os reagentes e produtos, respetivamente, para a j -ésima espécie química na i -ésima reação, L é número total de reações e X_j é a espécie j . A taxa de produção líquida da espécie j em um mecanismo de múltiplas etapas é:

$$\dot{\omega}_j = \sum_{i=1}^L \nu_{ji} q_i \quad \text{para } j = 1, 2, \dots, N, \quad (5.3)$$

onde $\nu_{ji} = (\nu''_{ji} - \nu'_{ji})$, N é o número total de espécies e q_i é a variável de taxa de progresso para a i -ésima reação.

$$q_i = k_{fi} \prod_{j=1}^N [X_j]^{\nu'_{ji}} - k_{ri} \prod_{j=1}^N [X_j]^{\nu''_{ji}}, \quad (5.4)$$

onde k_{fi} e k_{ri} são os coeficientes de taxa direita e reversa para a reação i . A razão entre os coeficientes de taxa para frente e reversa é igual ao coeficiente de equilíbrio:

$$K_c(T) = \frac{k_{fi}(T)}{k_{ri}(T)} \quad (5.5)$$

Em um motor a combustão interna, devido à alta temperatura durante a combustão e início da expansão, a composição local dos gases aproxima-se à composição de equilíbrio para a temperatura, pressão e razão de equivalência (local). Ao longo da expansão, reações de recombinação “reorganizam e simplificam” a composição dos gases. No final da expansão e início da exaustão as reações de recombinação não conseguem manter o equilíbrio químico nos gases, e na exaustão a composição dos gases não muda mais representativamente e atinge o estado de “frozen”. Por outra parte, não todo o combustível que entra no motor é queimado no interior do

cilindro já que há ineficiência na combustão mesmo quando a percentagem de excesso de ar é pequeno. Os motores diesel, normalmente funcionam com misturas combustível-ar por baixo da composição estequiométrica ($\Phi < 0,8$), e a combustão neste tipo de motores é essencialmente completa, levando em conta que a ineficiência de combustão é pequena.

No motor diesel, os gases de exaustão contêm oxido de nitrogênio (NO), pequenas quantidades de dióxido de nitrogênio (NO₂), e partículas de fuligem. Enquanto a fumaça e outros produtos tais como hidrocarbonetos não queimados e monóxido de carbono representam a ineficiência da combustão, a magnitude desta ineficiência é pequena.

Os particulados originados na combustão em motores diesel consistem de partículas de carbono com pequena concentração de hidrogênio. As partículas primárias sofrem agregação formando estruturas com forma de colares de pérolas. Após exaustão, hidrocarbonetos formados da combustão parcial sofrem adsorção formando a fração volátil da fuligem. . Muito deste material é consequência de combustão incompleta de combustível, e alguma contribuição do óleo lubrificante.

O NO e o NO₂ são normalmente agrupados como emissões denominadas genericamente de NO_x. Na combustão de combustíveis que não contêm nitrogênio na sua composição elementar, o óxido nítrico é formado por mecanismos cinéticos que envolvem o nitrogênio do ar.

A combustão em motores de ignição por compressão é formada por quatro fases principais. Na Fig. 50 é mostrado o processo de compressão-ignição e combustão, onde SOI é início da injeção (*Start of Injection*) e EOI é fim da injeção (*End of Injection*). Nesta figura podem ser identificadas as seguintes fases, (Heywood, 1988):

- Atraso na ignição (ab). É o tempo entre a injeção de combustível na câmara de combustão e o início da combustão.
- Fase de combustão rápida ou pré-misturada (bc). Ocorre a combustão de combustível que foi misturado com ar no tempo de atraso da ignição. Na queima de combustível nesta fase é obtida uma alta taxa de liberação de calor. A taxa de liberação de calor em esta fase da combustão é controlada pela velocidade das reações químicas e pela quantidade de mistura combustível-ar formada durante o atraso de ignição.

- Fase de combustão controlada pela difusão (cd). Ao ser consumido o combustível e ar misturado no atraso da ignição, a combustão passa a ser controlada pela mistura disponível para combustão. Aqui ocorre vaporização do combustível líquido, mistura de vapor de combustível com ar, reações químicas pre-chama, e a taxa de combustão é controlada numa fase primária pela mistura do vapor de combustível e ar. A taxa de liberação de calor é possível que apresente, ou não, um pico no diagrama de liberação de calor versus ângulo de manivela.
- Fase de pós-combustão (de). A liberação de calor continua a uma taxa baixa na etapa de expansão o qual pode ser devido a que uma pequena fração de combustível ainda não foi queimada. Com a expansão do êmbolo no sentido do ponto morto inferior, as temperaturas na câmara de combustão são reduzidas. As taxas de reação diminuem com a temperatura, de modo que a combustão é controlada quimicamente. Esta fase é de extrema importância para a oxidação da fuligem previamente formada.

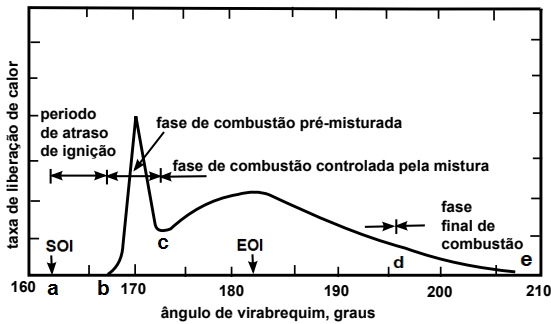


Figura 50 – Fases de combustão em um motor diesel. (Adaptado de (Heywood, 1988))

O início da combustão é identificado pela mudança de inclinação na curva da taxa de liberação do calor, obtida dos dados de pressão no cilindro, identificado como o ponto no qual ocorre a ignição. Antes que a energia química do combustível líquido injetado seja liberada, ocorrem processos físicos e químicos. Os processos físicos são atomização do líquido, vaporização das gotas de combustível,

mistura de vapor de combustível com ar. Os processos químicos são as reações de pré-combustão do combustível-ar, mistura de gases residuais, os quais levam à autoignição. O componente químico do atraso da ignição é controlado pelas reações de pré-combustão do combustível, e embora a ignição ocorra em região de fase vapor, podem ocorrer reações de oxidação na fase líquida entre as moléculas de combustível e o oxigênio dissolvido nas gotas de combustível. Simultaneamente está ocorrendo a quebra de grandes moléculas de hidrocarbonetos em pequenas moléculas. Os estudos de atraso da ignição têm mostrado que a temperatura (T) e pressão (p) do ar são as variáveis mais importantes para uma composição dada de combustível, e os dados experimentais são correlacionados com a seguinte expressão de Arrhenius

$$\tau_{id} = Ap^{-n} e^{\left(\frac{E_A}{RT}\right)}, \quad (5.6)$$

onde τ_{id} é o atraso de ignição, E_A é a energia de ativação aparente, A e n são constantes que dependem do combustível.

O cálculo do atraso de ignição apresenta dificuldade devido a que não são conhecidas às condições locais de concentração de espécies e temperatura para usar informação cinética. Têm sido propostas correlações para a predição do atraso de ignição em função das variáveis do motor e de carga de ar, e estas relações têm a forma da Equação (5.6), baseadas nos dados experimentais. Uma aproximação prática pode ser usada para o cálculo do atraso de ignição em ângulo de virabrequim, usando a correlação empírica baseada em T [K] e p [bar] numa condição de carga apropriada, (Heywood, 1988),

$$\tau_{id} = (0,36 + 0,22\bar{S}_p) e^{\left[E_A \left(\frac{1}{RT} - \frac{1}{17190}\right) \left(\frac{21,2}{p-12,4}\right)^{0,63}\right]}, \quad (5.7)$$

onde, a energia de ativação é $E_A = 618840/(CN + 25)$ [J/mol].

Em motores diesel as análises experimentais de liberação de calor mostram que a maioria do combustível (perto do 75%) é queimado na fase de combustão controlada pela mistura. A taxa de conversão de energia química pela combustão é modelada globalmente como

$$\dot{S}_{r,f} = \dot{m}_{r,f} \Delta h_{r,f}, \quad (5.8)$$

onde $\Delta h_{r,f}$ é o poder calorífico inferior do combustível e $\dot{m}_{r,f}$ é a vazão de queima de massa de combustível, a qual pode ser obtida conhecendo a fração de massa de combustível queimada Y_b e sua variação com o tempo, ou seja, a equação anterior, pode ser expressa

da seguinte forma:

$$\dot{S}_{r,f} = m_{f,o} \Delta h_{r,f} \frac{dY_b}{dt}. \quad (5.9)$$

Para a obtenção da fração de massa de combustível queimada no modelo de combustão, uma opção é usar a função de Wiebe. O modelo da combustão também pode ser feito com duas funções de Wiebe. Para o cálculo da fração de combustível queimado, (Heywood, 1988), é usada

$$Y_b = \beta \left[1 - \exp \left[-a_1 \left(\frac{\theta - \theta_1}{\Delta\theta_1} \right)^{m_1+1} \right] \right] + (1 - \beta) \left[1 - \exp \left[-a_2 \left(\frac{\theta - \theta_2}{\Delta\theta_2} \right)^{m_2+1} \right] \right], \quad (5.10)$$

onde β é quantidade de massa de combustível queimado no regime de combustão pré-misturada, $(1 - \beta)$ é a quantidade de massa de combustível queimado no regime de combustão controlada pela difusão de massa, θ_1 é o ângulo de início de combustão pré-misturada, θ_2 é o ângulo de início de combustão controlada pela difusão de massa, $\Delta\theta_1$ é o ângulo de duração de combustão pré-misturada, $\Delta\theta_2$ é o ângulo de duração da combustão por difusão.

Ao analisar a combustão desde um modelo simples de queima da gota, onde a evaporação da gota de combustível envolve transferência de massa de acordo ao descrito no Capítulo 4, a conservação total de massa na fase de gás é descrita como: $\dot{m} = \dot{m}_f = cte$, ou seja que a vazão total é igual a vazão de combustível, ou seja a taxa de queima. Na região interna da chama, como visto na Fig. 51, a espécie importante em difusão é o vapor de combustível. A partir da lei de Fick e usando as coordenadas esféricas onde as variações são somente na direção radial, é obtido:

$$\dot{m}_F = -4\pi r^2 \frac{\rho \mathcal{D}}{1 - Y_F} \frac{dY_F}{dr} \quad (5.11)$$

onde Y_F é a fração de massa de combustível. As condições de contorno que satisfazem a Equação (5.11) são: na superfície da gota prevalece o equilíbrio líquido-vapor, $Y_F(r_s) = Y_{F,s}(T_s)$; na chama o combustível desaparece $Y_F(r_f) = 0$. O subscrito f representa a chama. Da solução da equação diferencial é possível obter $Y_{F,s}$ e a fração de massa de produtos de combustão pode ser expressada como $Y_{Pr}(r) = 1 - Y_F(r)$.

Na região externa da chama, a espécie importante em difusão é o oxidante, a qual é transportada radialmente para dentro da chama. Na chama o oxidante e combustível são combinados numa proporção estequiométrica ν , de acordo com $(1 \text{ kg})_{comb} + (\nu \text{ kg})_{oxid} = (\nu + 1) \text{ kg}_{produtos}$, ver Fig. 51.

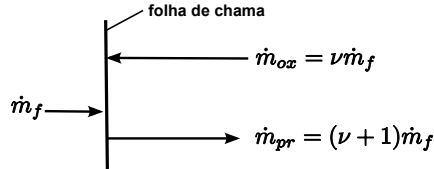


Figura 51 – Relações de fluxo massa na superfície da chama. (Adaptado de (Turns, 2000))

O balanço de energia na superfície da gota mostra que o calor é conduzido da chama \dot{Q}_{g-i} até a fase gás na superfície da gota, e uma quantidade de energia é usada para evaporar combustível $\dot{m}_F h_{fg}$ e o restante é conduzido ao interior da gota \dot{Q}_{i-l} . A quantidade de energia conduzida ao interior da gota, pode se aproximar à energia requerida para aquecer o combustível que é evaporado desde a temperatura inicial T_o até T_s , o seja que $\dot{Q}_{i-l} = \dot{m}_F (T_s - T_o)$. Também pode se assumir que as gotas têm temperatura uniforme com um período transiente de aquecimento, e então o calor conduzido ao interior $\dot{Q}_{i-l} = m_d C_{pl} \frac{dT_s}{dt}$, ou $q_{i-l} = \frac{m_d C_{pl}}{\dot{m}_f} \frac{dT_s}{dt}$ onde m_d é a massa da gota.

No balanço de energia na chama, há vários fluxos de energia, e o calor é transferido desde a chama na direção da gota \dot{Q}_{f-i} , e na direção do infinito $\dot{Q}_{f-\infty}$. A energia química liberada na chama é levada em conta usando os fluxos de entalpia absoluta do combustível, oxidante e produtos. O calor de combustão Δh_c é independente da temperatura já que $C_{pg} = cte$. Escolhendo a temperatura da chama como estado de referencia para simplificar a equação de balanço de energia, é obtido que o fluxo com o qual a energia química é convertida em energia térmica na chama é igual ao fluxo com o qual o calor é conduzido longe da chama, assim

$$\dot{m}_F \Delta h_c = \dot{Q}_{f-i} + \dot{Q}_{f-\infty}. \quad (5.12)$$

Na interface de vapor-líquido a pressão parcial do vapor de combustível é dada pela aproximação de Clausius - Clapeyron, e

usando também a relação de pressão parcial de combustível com a fração molar e fração de massa de combustível é obtida uma relação entre $Y_{F,s}$ e T_s .

5.1.2 Objetivo do capítulo

O objetivo é fazer a simulação numérica de combustão de spray de um motor de injeção direta de ignição por compressão, naturalmente aspirado, operando com óleo diesel e mistura de 80% de óleo de soja e 20% de óleo diesel (mistura 80s20d), identificando as metodologias de modelagem de escoamento, spray e combustão.

Fazer a análise da fenomenologia do processo de combustão de spray em motores de ignição por compressão considerando o escoamento turbulento no cilindro, identificando de esta forma a metodologia de modelagem dos diferentes fenômenos ali presentes.

Fazer a simulação numérica da combustão de spray no motor de ignição por compressão usando óleo diesel e mistura de óleo de soja-diesel, considerando escoamento compressível tridimensional, usando a metodologia das equações de Navier-Stokes com médias de Reynolds (RANS) e o modelo de turbulência $k - \varepsilon RNG$.

Caracterizar numericamente o comportamento da combustão de spray, além da atomização de spray do óleo diesel e da mistura 80s20d, usando parâmetros como a penetração de spray, penetração de vapor, tamanho de gota, pressão no cilindro, temperatura no cilindro, taxa de liberação de calor, atraso de ignição, estrutura da chama, formação de NOx e fuligem via pós-processamento de resultados das simulações.

Fazer uma revisão das pesquisas realizadas em combustão de spray de óleo diesel e de spray de óleo de soja em motores de ignição por compressão, com o objetivo de obter parâmetros para a validação dos dados obtidos nas simulações no presente trabalho.

5.1.3 Organização do capítulo

Inicialmente no presente capítulo é feita uma revisão dos parâmetros importantes na combustão de spray em motores de ignição por compressão, descrevendo cada um deles e sua modelagem. Para cada um dos parâmetros é analisada sua importância na análise que será feita usando os resultados das simulações, para cada um dos combustíveis usados.

É feita uma descrição teórica da combustão em motores de ignição por compressão, referenciando os diferentes tipos de com-

bustão, definindo conceitos importantes como penetração de spray, penetração de vapor, estequiometria, ignição, razão de equivalência, combustão turbulenta pré-misturada, combustão turbulenta não pré-misturada e fração de mistura.

Posteriormente é feita uma descrição da metodologia de solução implementada no software *Converge CFD*, identificando a geometria usada na simulação, as características do método numérico, condições de contorno e condições iniciais.

Os resultados obtidos nas simulações são relacionados ao final do capítulo, onde são usados dados obtidos de forma experimental na bancada existente no LABCET, com o objetivo de fazer a validação do modelo numérico.

5.2 TEORIA DE COMBUSTÃO TURBULENTA

A combustão da mistura combustível-ar no cilindro num motor a combustão interna é um dos processos que controla a potência do motor, a eficiência e as emissões. A combustão é uma reação rápida exotérmica na fase gasosa onde usualmente o oxigênio é um dos reagentes. A chama é uma reação de combustão que se propaga de forma sub sônica no espaço e o movimento dela em relação aos gases não queimados é uma característica importante. O movimento da chama implica que a reação química está confinada em uma zona de espessura pequena quando comparada com as medidas da câmara de combustão, e a zona de reação é chamada de frente de chama. A propagação espacial da chama é o resultado de um forte acoplamento entre a reação química, o processo de transporte de difusão de massa e condução de calor, e escoamento.

A chama pode ser classificada de acordo com a composição dos reagentes e como eles entram na zona de reação. Chama pré-misturada quando o combustível e o oxidante são uniformemente misturados e chama de difusão quando os reagentes não estão pré-misturados e então devem misturar-se na própria região onde a reação ocorre, e a mistura então deve ser realizada pelo processo de difusão. Outro tipo de classificação da chama é em relação aos parâmetros básicos do escoamento do gás através da zona de reação, e é chamada chama laminar ou chama turbulenta. Mais uma classificação da chama é se a chama está em estado estável ou transiente. Em um motor a chama está em estado transiente e é turbulenta.

5.2.1 Formação de mistura

No motor a combustão interna, a massa, a quantidade de movimento e a energia são transferidas de um ponto a outro, além de ocorrer processos tais como evaporação de combustível, mistura de combustível-ar, atrito do gás-sólido e transferência de calor entre o gás e as paredes da câmara de combustão. No motor a maioria destes processos são turbulentos e estão influenciados pelas propriedades do escoamento e do combustível líquido.

O combustível líquido injetado e atomizado em pequenas gotas, na saída do injetor tem que ser evaporado depois para poder se misturar como ar e queimar. Em um motor diesel a formação de mistura depende da interação do spray combustível com o escoamento no cilindro. O período desde o início da injeção até o início da combustão (atraso de ignição) é influenciado por fatores físicos que dependem do projeto do sistema de injeção, câmara de combustão e condições de operação. As variáveis do sistema de injeção que afetam o desenvolvimento do spray são tempo de injeção, quantidade, velocidade, taxa de injeção, tamanho da gota e forma do spray. As condições relevantes de carga dependem do sistema de combustão usado, detalhes da câmara de combustão, pressão e temperatura do ar na entrada, razão de compressão, tempo de injeção, fração residual de gás, temperatura do líquido de arrefecimento e velocidade do motor.

A formação de mistura depende da energia induzida pelo sistema de injeção e da interação entre o spray de combustível e o escoamento no cilindro. No cilindro há duas estruturas principais do escoamento para a formação da mistura, as quais são a rotação do escoamento ao redor do eixo do cilindro ou *swirl*, e o *quish* gerado quando o pistão aproxima-se ao PMS e gera deslocamento dos gases no cilindro.

Para calcular o spray penetrando na atmosfera gasosa da câmara de combustão, a fase dispersa e a fase contínua precisam ser consideradas. A fase gasosa é descrita usando as equações RANS com modelos de turbulência, e em cada tempo t esta formulação Euleriana descreve o comportamento dos parâmetros relevantes do escoamento (v, p, T, ρ) como uma função da posição (x, y, z) , para todo o campo de escoamento tridimensional. A formulação Euleriana não é apropriada para a descrição da fase dispersa. As gotículas são tratadas como pontos de massa individuais para os quais sua velocidade é reduzida pelas forças de arrasto devido à velocidade relativa entre o gás e as gotículas, e a massa é reduzida pela eva-

poração. O comportamento das duas fases é acoplado porque existe troca de quantidade de movimento, energia e massa entre elas. Termos fonte nas equações de conservação de fase gasosa permitem o aumento ou diminuição destas trocas, (Baumgarten, 2006).

A abordagem Lagrangiana de gota e Euleriana de fluido é usada em códigos multidimensionais CFD para a iteração de fases líquido-gás que resultem da injeção a alta pressão de combustível líquido em motores diesel. Em esta abordagem o spray é representado por parcelas computacionais discretas que têm iguais características e influenciadas pela quebra, colisão e coalescência, e assim determina a distribuição do tamanho e composição das gotículas. Também é necessário o modelo de evaporação de gota, (Lakshminarayanan & Aghav, 2010).

A mistura de combustível e oxidante na combustão turbulenta depende do processo de mistura turbulenta. De forma geral, uma vez que uma faixa de vórtices de diferentes tamanhos têm sido formados, a tensão e cisalhamento na interface entre os vórtices aumenta a mistura. Durante o processo de quebra de vórtices e a formação de pequenos vórtices, a tensão e o cisalhamento podem aumentar e assim aumentam-se os gradientes de concentração na interface entre reagentes, os quais por sua vez aumentam sua difusão intermolecular, e por tanto a mistura de combustível e oxidante tem lugar na interface entre pequenos vórtices. Uma consideração similar aplica uma vez a chama é desenvolvida, para a condução de calor e a difusão de radicais fora da zona de reação na interface.

5.2.2 Combustão turbulenta pré-misturada

A combustão pré-misturada requer que o combustível e o oxidante sejam completamente misturados antes que a combustão ocorra. Enquanto o combustível e o oxidante sejam homogeneamente misturados e é subministrada uma fonte de calor, isto possibilita que a frente de chama seja propagada através da mistura, e ocorre se a razão de ar/combustível fica dentro dos limites de inflamabilidade.

Tipicamente, o gás detrás da frente de chama rapidamente aproxima-se ao estado de gás queimado perto do equilíbrio químico. A mistura em frente da chama permanece em estado não queimado, então o sistema de combustão contem dois estados: o gás em estado queimado e o gás em estado não queimado, e em combustão pré-misturada os dois estados são separados pela frente de chama, onde ocorre a transição de um estado em outro.

Em combustão pré-misturada, a quantidade importante é a velocidade com a qual a frente de chama se propaga normal a ela mesma, e relativa ao escoamento da mistura não queimada, chamada de velocidade laminar (S_L). De forma similar, para uma combustão turbulenta tem-se a velocidade turbulenta da chama (S_t), a qual é uma velocidade de propagação que depende das características do escoamento e das propriedades da mistura. A velocidade de chama turbulenta (S_t) para um observador localizado na chama é a velocidade com a qual a mistura não queimada entra na zona de chama em direção normal à chama. A estrutura de uma chama turbulenta pré-misturada contém várias zonas: zona de preaquecimento quimicamente inerte, seguida por uma camada interna (δ) (reação de consumo de combustível) onde o combustível é consumido e os radicais são esgotados pelas reações de quebra de cadeia, que depende da pressão. Mais uma camada é a de oxidação (ϵ). A estrutura da chama é governada pelas relações de escala de Kolmogorov (ℓ_k) (Equação (3.13)), e a escala integral (ℓ_o) com a espessura da chama $\ell_f = \alpha/S_L$, (Turns, 2000). A espessura da camada interna é uma fração da espessura da chama, definida como $\ell_\delta = \delta\ell_f$.

O número de Reynolds turbulento (Re) e o número de Damköhler turbulento (Da) são definidos em termos de intensidade turbulenta (v') e da escala integral como

$$Re = \frac{v'\ell_o}{S_L\ell_f} \quad e \quad Da = \frac{S_L\ell_o}{v'\ell_f}. \quad (5.13)$$

Da mesma forma, usando as escalas de tempo, comprimento e velocidade de Kolmogorov são definidos o primeiro número de Karlovitz turbulento (Ka) e o segundo número de Karlovitz turbulento (Ka_δ) como

$$Ka = \frac{t_f}{t_k} = \frac{\ell_f^2}{\ell_k^2} = \frac{v_k^2}{S_L^2} \quad e \quad Ka_\delta = \frac{\ell_\delta^2}{\ell_k^2} \quad (5.14)$$

A chama pré-misturada é referida que tem regimes de acordo à Fig. 52 onde $v'/S_L = Re(\ell_f/\ell_o)$, (Peters, 2000). Na Fig. 52 as linhas de $Re = 1$, $Ka = 1$, $Ka_\delta = 1$, e $v'/S_L = 1$ representam as fronteiras dos diferentes regimes. O regime de flamelets enrugados pode não ser considerado, devido a que a velocidade de rotação v' dos redemoinhos grandes não são suficientemente grandes para competir com o avance da frente de chama, e a propagação laminar domina o frente de chama.

O regime de zonas de reação interrompida onde a micro escala de Kolmogorov (ℓ_k) é menor que a espessura da camada interna ℓ_δ , os redemoinhos podem entrar na camada interna e perturbar-la com a consequência de quebra química local que produz perda de calor para a zona pré-aquecida, seguida por diminuição de T , e perda de radicais, com o qual a chama pode se extinguir.

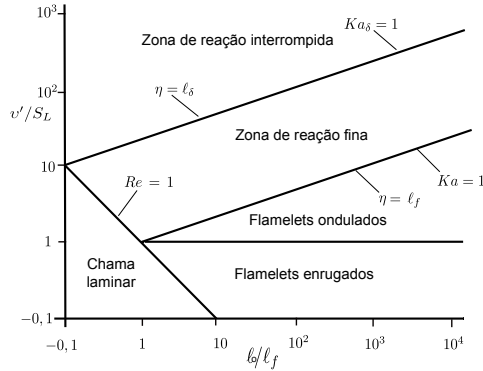


Figura 52 – Diagrama de regimes de combustão turbulenta pré-misturada. (Adaptado de (Peters, 2000))

O regime de flamelets ondulados e zonas de reação fina, são importantes, já que em Re altos, a frente de chama pode manifestar misturas locais fortes de pequenos redemoinhos, por exemplo no regime de zonas de reação fina, tanto como região bastante suaves onde há flamelets ondulados.

No regime de flamelets ondulados $\ell_f < \ell_k$ o qual indica que toda a estrutura reativa-difusiva de chama está inserida dentro dos redemoinhos do tamanho da micro escala de Kolmogorov, onde o escoamento é quase laminar, então a estrutura da chama não é perturbada pelas flutuações turbulentas. No regime de flamelets ondulados o tamanho dos redemoinhos que localmente interatuam com a frente de chama com velocidade de rotação igual a S_L , é dado pela escala de comprimento de Gibson (ℓ_G):

$$\ell_G = \ell_o \left(\frac{S_L}{v'} \right)^3 \quad (5.15)$$

O regime de zonas de reação fina tem como fronteira a condição onde a espessura de chama é igual à micro escala de Kolmogorov

(critério Williams-Klimov). Neste regime, os vórtices pequenos de tamanho ℓ_k podem entrar na estrutura reativa-difusiva de chama, e estes vórtices ainda são maiores que ℓ_δ e não podem penetrar na camada interna. Neste regime os pequenos vórtices podem entrar na zona de pré-aquecimento e incrementam a mistura escalar, (Peters, 2000). Na zona de reação fina, definindo a escala de comprimento ℓ_m (Equação (5.16)) como o tamanho de um vórtice dentro de uma faixa inercial, que tem um tempo de rotação igual ao tempo necessário para difusão de escalares numa distância igual à espessura de difusão ℓ_D (Equação 5.17). Durante este tempo de rotação um vórtice de tamanho ℓ_m pode interatuar com a frente de reação avançando e poderá transportar fluido pré-aquecido desde uma região de espessura ℓ_D em frente da zona de reação sobre uma distância correspondente ao seu próprio tamanho.

$$\ell_m = (\varepsilon t_q^3)^{1/2} \quad (5.16)$$

$$\ell_D = \sqrt{\alpha t_q} \quad (5.17)$$

onde, t_q é o tempo de extinção.

5.2.2.1 Abordagem de curva de nível para regime de flamelets ondulados

É um modelo para combustão turbulenta pré-misturada, baseado num escalar não reativo G (escalar passivo), o qual evita complicações associadas com o gradiente de difusão e não precisa de termo fonte para fechar. Uma equação para G pode se obter considerando uma superfície iso-escalar.

$$G(x, t) = G_o \quad (5.18)$$

O parâmetro G divide a superfície em duas regiões: $G > G_o$, região de gás queimado e $G < G_o$, região de mistura não queimada, e $G = G_o$ indica que a chama fica nessa localização, e a escolha de G_o é arbitraria mas fixa para um evento de combustão. A equação de campo ou equação G é:

$$\frac{\partial G}{\partial t} + v_f \nabla G = S_L |\nabla G| \quad (5.19)$$

onde, v_f é velocidade de escoamento. A Equação (5.19) é chamada de Equação-G na combustão.

A Equação-G é adequada para a descrição da combustão turbulenta pré-misturada em regime de flamelets ondulados, onde é assumido que a espessura da chama laminar é menor que a menor escala de comprimento turbulento (escala de Kolmogorov). Portanto, a totalidade da estrutura da chama está embebida dentro de um campo de escoamento localmente quase-laminar e a velocidade laminar de queima permanece bem definida.

5.2.2.2 Abordagem de curva de nível para regime de zonas de reação fina

Na zona de reação fina, é o caso onde a estrutura da chama não pode ser assumida quase-estacionária devido a que os vórtices de Kolmogorov entram à zona pré-aquecida e produzem perturbações instáveis.

A camada interna é identificada como a zona de reação fina e sua localização pode ser determinada pela superfície iso-escalar de temperatura $T(x, t) = T_0$, onde T_0 é a temperatura de camada interna. Considerando a equação de energia em função de T , é derivada uma expressão para a velocidade de deslocamento S_d para uma iso-superfície de um escalar difusivo não reativo como, (Peters, 2000)

$$S_d = \left[\frac{\nabla(\rho\alpha\nabla T) + w_T}{\rho|\nabla T|} \right], \quad (5.20)$$

onde, w_T é o termo fonte químico.

A equação-G que descreve a localização da zona de reação fina, tal que a iso-superfície $T(x, t) = T_0$ coincide com a iso-superfície definida por $G(x, t) = G_0$ para estrutura de chama de espessura finita, pode ser definida a partir do vetor normal da iso-superfície de temperatura, o qual é

$$n = - \left. \frac{\nabla T}{|\nabla T|} \right|_{T=T_0}, \quad (5.21)$$

e como este vetor normal é igual ao vetor normal de $G(x, t) = G_0$ e apontando para a mistura não queimada, usando esta definição e a Equação (5.19) é obtida a equação de nível definido para estrutura de chama de espessura finita.

$$\frac{\partial G}{\partial t} + v \cdot \nabla G = S_{L,s} |\nabla G| - \alpha k |\nabla G| \quad (5.22)$$

onde α é a difusibilidade térmica e $k = \nabla \cdot n$.

Uma equação válida nos dois regimes é (flamelets ondulados e reação fina)

$$\rho \frac{\partial G}{\partial t} + \rho v \cdot \nabla G = (\rho S_L^0) \sigma - (\rho \alpha) k \sigma. \quad (5.23)$$

onde S_L^0 é velocidade de queima.

5.2.2.3 Modelagem de combustão turbulenta pré - misturada baseada na Equação G

A equação G pode ter propriedades similares a outras equações de campo usadas na dinâmica de fluidos e mistura escalar. Isto permite definir para um ponto x e tempo t no campo do escoamento, a função de densidade de probabilidade $P(G : x, t)$ para o escalar G . A média e a variância são

$$\bar{G}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} GP(G : x, t) dG, \quad (5.24)$$

$$\overline{G'^2}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} (G - \bar{G})^2 P(G : x, t) dG. \quad (5.25)$$

A densidade de probabilidade na superfície da chama é

$$P(G_o : x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(G - G_o) P(G : x, t) dG = P(x, t). \quad (5.26)$$

O modelo de equação G é baseado no conceito que a combustão turbulenta pré-misturada ocorre na zona de régimen flamelets ondulados ou na zona de régimen de reação fina. Para a formulação da média de Favre em combustão turbulenta, G e o vetor velocidade são divididas em duas partes, a média de Favre e a flutuação assim

$$G = \tilde{G} + G'', \quad u_i = \tilde{u}_i + u_i''. \quad (5.27)$$

Na chama turbulenta G foi interpretada como a distância escalar entre a frente de chama instantânea e frente de chama médio avaliado em $G(x, t) = G_o$, a média de Favre $\tilde{G} = \bar{\rho} \bar{G} / \bar{\rho}$ representa a média Favre da distância. Partindo da Equação (5.22) é possível obter a equação para o valor médio de Favre de G , (Peters, 2000), (Richards *et al.*, 2016), assim

$$\frac{\partial \rho \tilde{G}}{\partial t} + \frac{\partial \rho \tilde{u}_i \tilde{G}}{\partial x_i} = -\mathcal{D}_t \kappa \left| \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_i} \right| + \rho_u S_t \left| \frac{\partial \tilde{G}}{\partial \tilde{x}_i} \right|, \quad (5.28)$$

e equação para a variância de G , $\widetilde{G''^2}$

$$\frac{\partial \rho \widetilde{G''^2}}{\partial t} + \frac{\partial \rho \widetilde{u}_i \widetilde{G''^2}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \mathcal{D}_t \frac{\partial \widetilde{G''^2}}{\partial x_i} \right) + 2\rho \mathcal{D}_t \frac{\partial \widetilde{G}}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{G}}{\partial x_i} - c_s \rho \widetilde{G''^2} \frac{\varepsilon}{k}, \quad (5.29)$$

onde S_t é a velocidade de chama turbulenta, ρ_u é a massa específica de gases não queimados, k é a energia cinética turbulenta, ε é a taxa de dissipação turbulenta e c_s é uma constante dada pelo usuário (constante do modelo). A curvatura media da frente de chama κ é

$$\kappa = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \widetilde{G}}{\partial x_i} / \left| \frac{\partial \widetilde{G}}{\partial x_i} \right| \right). \quad (5.30)$$

O coeficiente de difusão turbulenta é

$$\mathcal{D}_t = \frac{C_\mu K^2}{Sc\varepsilon}. \quad (5.31)$$

A posição da frente de chama é definido na localização onde $G(x, t) = 0$ na solução da Equação (5.28).

5.2.3 Combustão turbulenta não pré-misturada

A combustão turbulenta não pré-misturada ou combustão difusiva, chamada assim devido a que a taxa de difusão controla o processo, é a combustão que está presente nos sistemas onde o combustível e o oxidante entram separadamente na câmara de combustão, onde é misturado e queimado durante interdifusão contínua (difusão do oxidante para o combustível e difusão de combustível para o oxidante). O tempo necessário para convecção e difusão, ambos sendo responsáveis pela mistura turbulenta, é muito maior que o tempo necessário para que as reações de combustão ocorram.

5.2.3.1 Fração de mistura

As equações de transporte seguem essencialmente o padrão de termos de convecção, difusão, termo fonte, e essas quantidades, no entanto, não fazem nenhuma contribuição para as equações termodinâmicas, portanto, são chamados de escalares passivos, ao contrário das espécies químicas genuínas chamadas de escalares ativos. Um escalar importante é a fração de mistura Z , e o campo de fração de mistura descreve os estados locais de mistura de dois gases, e cada

gás pode se assumir como uma mistura homogênea de espécies diferentes. Enquanto não há nenhuma reação, pode se expressar como, (Turns, 2000), (Merker *et al.*, 2009):

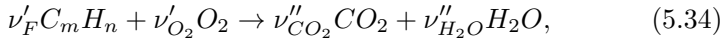
$$Z = \frac{\rho_{g1}}{\rho_{g1} + \rho_{g2}} \quad (5.32)$$

onde ρ é a massa específica do gás. Z tem o valor de 1 no escoamento de combustível e um valor de 0 no escoamento de oxidante.

Num sistema com duas fases com um escoamento 1 de combustível de vazão de massa de combustível \dot{m}_1 , e um escoamento 2 de oxidante com vazão de massa de oxidante \dot{m}_2 , a fração de mistura Z é definida em qualquer localização do sistema como

$$Z = \frac{\dot{m}_1}{\dot{m}_1 + \dot{m}_2}. \quad (5.33)$$

Se o sistema é homogêneo contendo combustível, oxigênio e substancias inertes sem difusão, a equação de reação global para completar a combustão de um combustível hidrocarboneto é dada por, (Peters, 2000):



onde ν'_F e ν'_{O_2} são os coeficientes estequiométricos do combustível e do oxigênio. A equação de reação relaciona as mudanças de fração de massa de oxigênio (dY_{O_2}) e de combustível (dY_F) da seguinte forma

$$\frac{dY_{O_2}}{\nu'_{O_2} W_{O_2}} = \frac{dY_F}{\nu'_F W_F}, \quad (5.35)$$

onde W_{O_2} e W_F são a massa molecular do oxigênio de combustível respetivamente. Ao fazer a integração da equação anterior é obtida a seguinte relação:

$$\nu Y_F - Y_{O_2} = \nu Y_{F,u} - Y_{O_2,u}, \quad (5.36)$$

$$\nu = \frac{\nu'_{O_2} W_{O_2}}{\nu'_F W_F}, \quad (5.37)$$

onde ν é a razão de massa estequiométrica de oxigênio/combustível, Y_F e Y_{O_2} são a fração de massa de combustível e de oxigênio correspondente a qualquer estado entre a zona não queimada e a zona queimada, e o subscrito u denota as condições iniciais na mistura não queimada.

A mistura é estequiométrica quando a razão de combustível/oxigênio e tal que são totalmente consumidos depois da combustão. Para que possa considerar-se mistura estequiométrica é requerido que a razão das concentrações de oxigênio e de combustível na mistura não queimada seja igual à razão de coeficientes estequiométricos

$$\frac{[X_{O_2}]_u}{[X_F]_u} \Big|_{st} = \frac{\nu'_{O_2}}{\nu'_F}, \quad (5.38)$$

ou em termos de fração de massa temos

$$\frac{Y_{O_2,u}}{Y_{F,u}} \Big|_{st} = \frac{\nu'_{O_2} W_{O_2}}{\nu'_F W_F} = \nu. \quad (5.39)$$

Se o sistema é homogêneo ou se a difusibilidade de combustível e oxidante são iguais, e as substâncias inertes são assumidas em um sistema não homogêneo, a fração de massa local de combustível $Y_{F,u}$ na mistura não queimada é relacionada com a fração de mistura, e também a fração de massa local de oxigênio $Y_{O_2,u}$ na mistura não queimada com a fração de mistura como segue:

$$Y_{F,u} = Y_{F,1}Z, \quad Y_{O_2,u} = Y_{O_2,2}(1 - Z), \quad (5.40)$$

onde, $Y_{F,1}$ é a fração de massa de combustível no escoamento de combustível, ($Y_F = 1$) para combustíveis puros, $Y_{O_2,2}$ é a fração de massa de oxigênio no escoamento de oxidante ($Y_{O_2,2} = 0,232$ para ar). A fração de mistura pode se obter assim

$$Z = \frac{\nu Y_F - Y_{O_2} + Y_{O_2,2}}{\nu Y_{F,1} + Y_{O_2,2}}, \quad (5.41)$$

onde, Y_F e Y_{O_2} são a fração de massa em qualquer estado da combustão entre não queimado e estado queimado.

Para uma mistura estequiométrica, o termo da direita da Equação (5.36) é igual a zero e a fração de mistura estequiométrica é

$$Z_{st} = \left[1 + \frac{\nu Y_{F,1}}{Y_{O_2,2}} \right]^{-1}. \quad (5.42)$$

A fração de mistura pode se relacionar com a razão de equivalência Φ (razão de combustível-ar na mistura não queimada) assim

$$\Phi = \frac{\nu Y_{F,u}}{Y_{O_2,u}} = \frac{Z}{1 - Z} \frac{(1 - Z_{st})}{Z_{st}}. \quad (5.43)$$

Uma forma mais geral de definir a fração de mistura é em termos de elementos químicos, já que numa reação química os elementos químicos são conservados. Para a_{ij} o número de átomos do elemento j na molécula de espécie i , e W_j o peso molecular de um átomo de j , a massa de todos os átomos j no sistema é

$$m_j = \sum_{i=1}^n \frac{a_{ij} W_j}{W_i} m_i. \quad (5.44)$$

A fração de massa do elemento j é

$$Z_j = \frac{m_j}{m} = \sum_{i=1}^n \frac{a_{ij} W_j}{W_i} Y_i, \quad (5.45)$$

para $j = 1, 2, \dots, n_e$ onde n_e é o número total de elementos no sistema. Assumindo um escoamento de difusão binária e que as difusibilidades são iguais $\mathcal{D}_i = \mathcal{D}$, a equação de balanço para a fração de massa do elemento é

$$\rho \frac{\partial Z_j}{\partial t} + \rho v \cdot \nabla Z_j = \nabla \cdot (\rho \mathcal{D} \nabla Z_j). \quad (5.46)$$

Definindo Z_C, Z_H, Z_O como a fração de massa dos elementos C, H, e O, e W_C, W_H, W_O como o peso molecular respetivamente, e com o coeficiente estequiométrico ν'_F da reação global como a unidade (1), a fração de massa dos elementos é

$$\frac{Z_C}{mW_C} = \frac{Z_H}{nW_H} = \frac{Y_{F,u}}{W_F}, \quad Z_O = Y_{O_2,u}. \quad (5.47)$$

A função de acoplamento é

$$\beta = \frac{Z_C}{mW_C} + \frac{Z_H}{nW_H} - 2 \frac{Z_O}{\nu'_{O_2} W_{O_2}}. \quad (5.48)$$

Isto corresponde à definição original de um escalar conservado, e pode ser normalizado para variar entre 0 e 1 como

$$Z = \frac{\beta - \beta_2}{\beta_1 - \beta_2}, \quad (5.49)$$

obtendo a definição de fração de mistura de Bilger's (1988)

$$Z = \frac{\frac{Z_C}{mW_C} + \frac{Z_H}{nW_H} + 2 \frac{Y_{O_2,2} - Z_O}{\nu'_{O_2} W_{O_2}}}{\frac{Z_{C,1}}{mW_C} + \frac{Z_{H,1}}{nW_H} + 2 \frac{Y_{O_2,2}}{\nu'_{O_2} W_{O_2}}}. \quad (5.50)$$

Se todas as difusibilidades \mathcal{D}_i são iguais a \mathcal{D} , Z satisfaz a equação de balanço

$$\rho \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho v \cdot \nabla Z = \nabla \cdot (\rho \mathcal{D} \nabla Z), \quad (5.51)$$

as condições de contorno são $Z = 1$ no escoamento de combustível e $Z = 0$ no escoamento de oxidante.

5.2.3.2 Regime de combustão turbulenta não pré - misturada

A combustão não pré-misturada pode ser descrita pela fração de mistura, a qual tem um papel similar ao escalar G na combustão pré-misturada na determinação da superfície de chama. Na Fig. 53, são mostrados os regimes de combustão turbulenta não pré-misturada em função da espessura de difusão no espaço da fração de mistura $(\Delta Z)_F$, (Peters, 2000)

$$(\Delta Z)_F = \left(\frac{\chi_{st}}{2a} \right)^{1/2} = 2Z_{st}, \quad (5.52)$$

onde χ_{st} é a taxa de dissipação escalar, a é a taxa de deformação. A espessura da zona de reação no espaço de fração de mistura $(\Delta Z)_R$ é

$$\frac{(\Delta Z)_R}{(\Delta Z)_F} = \varepsilon_q \left(\frac{\chi_{st}}{\chi_q} \right)^{1/4}, \quad (5.53)$$

onde χ_q é a taxa de dissipação escalar na extinção, ε_q é a espessura de camada de oxidação na extinção. A flutuação de fração de mistura é

$$Z' = (\widetilde{Z''^2})^{1/2}. \quad (5.54)$$

A flutuação da média estequiométrica de mistura é

$$Z'_{st} = (\widetilde{Z''^2})_{st}^{1/2}. \quad (5.55)$$

A taxa de dissipação escalar estequiométrica média Favre é $\widetilde{\chi}_{st}$.

Na Fig. 53, para grandes flutuações de fração de mistura, onde $Z'_{st} > (\Delta Z)_F$, as flutuações no espaço da fração de mistura estendem-se a misturas suficientemente ricas e magras de tal modo que as camadas de difusão que rodeiam a zona de reação são separadas. Para flutuações de fração de mistura pequenas $Z'_{st} < (\Delta Z)_F$,

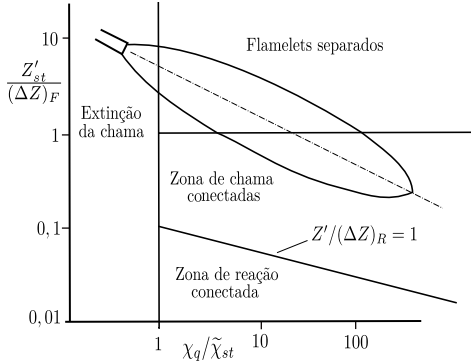


Figura 53 – Diagrama de regimes de combustão turbulenta pré-misturada. (Adaptado de (Peters, 2000))

as quais pode ser devido a mistura intensa ou pré-mistura parcial da corrente de combustível, as zonas de reação são conectadas. O critério de $Z'_{st}/(\Delta Z)_F = 1$, distingue dois regimes, regímen de flamelets separados e zona de flamelets conectados.

5.2.3.3 Modelagem de combustão turbulenta não pré - misturada

Para o modelo de combustão turbulenta é usado normalmente o abordagem de função de densidade de probabilidade (PDF). A abordagem de PDF requer conhecer a fração de mistura e a variância da fração de mistura $\widetilde{Z''^2}$. Usando a fração de mistura média de Favre \widetilde{Z} e a variância $\widetilde{Z''^2}$ na posição x e no tempo t , a equação para a fração de mistura média de Favre é

$$\frac{\partial \widetilde{\rho Z}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho u_i Z}}{\partial x_i} = - \frac{\partial \widetilde{\rho u_i'' Z''}}{\partial x_i} + S_{RIF}, \quad (5.56)$$

onde o gradiente de transporte é

$$\widetilde{u_i'' Z''} = - \mathcal{D}_t \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_i}. \quad (5.57)$$

A equação para a variância de fração de mistura de Favre é

$$\frac{\partial \widetilde{\rho Z''^2}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho u_i Z''^2}}{\partial x_i} = - \frac{\partial \widetilde{\rho u_i'' Z''^2}}{\partial x_i} - 2(\widetilde{\rho u_i'' Z''}) \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_i} - \widetilde{\rho \chi_i}, \quad (5.58)$$

onde a taxa de dissipação escalar média definida como $\tilde{\chi} = 2\mathcal{D}|\widetilde{\nabla Z''}|^2$, e pode ser modelada como

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \widetilde{Z''^2}, \quad (5.59)$$

onde C_χ é a razão de escala de tempo e é constante, S_{RIF} é o termo fonte, $\tilde{\varepsilon}$ é a dissipação turbulenta, \tilde{k} é a energia cinética turbulenta e \mathcal{D}_t é o coeficiente de difusividade turbulenta.

Em muitos casos para a chama de difusão turbulenta de jatos em ar, pode ser imposta a condição de contorno de gradiente zero, exceto na entrada. Assumindo simplificações, então a entalpia h pode se relacionar com a fração de mistura por uma relação linear assim

$$h = h_2 + Z(h_1 - h_2) \quad \text{ou} \quad \tilde{h} = h_2 + \tilde{Z}(h_1 - h_2). \quad (5.60)$$

Com as Equações (5.56) e (5.58) pode se obter a fração de mistura média de Favre e a variância de fração de mistura em cada ponto do campo de escoamento turbulento, assumindo que ρ do campo é conhecida. Também têm que ser resolvidas as equações para o campo de escoamento turbulento, equações de tensor de Reynolds (ou equações de k e ε).

Usando a relação de fração de mistura e entalpia, é fácil obter valores médios para os escalares reativos usando o abordagem de função de densidades de probabilidade (PDF), e é chamado modelo de equilíbrio de escalar conservado. Nesta abordagem é assumida com antecedência uma função de densidade de probabilidade de dois parâmetros com valores conhecidos de \tilde{Z} e $\widetilde{Z''^2}$ em cada ponto do campo do escoamento. A função β PDF é comumente usada para PDF de Favre em combustão turbulenta não pré-misturada, dada por

$$\tilde{P}(Z : x, t) = \frac{Z^{\alpha-1}(1-Z)^{\beta-1}}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \Gamma(\alpha + \beta), \quad (5.61)$$

onde Γ é a função gamma. Os parâmetros α e β são relacionados com a média de Favre e a variância como

$$\alpha = \tilde{Z}\gamma, \quad \beta = (1 - \tilde{Z}), \quad \gamma = \frac{\tilde{Z}(1 - \tilde{Z})}{\widetilde{Z''^2}} - 1 \geq 0. \quad (5.62)$$

Usando a abordagem PDF, os valores médios de qualquer quantidade que depende só da fração de mistura ($\tilde{\psi}$) pode ser calculada como

$$\tilde{\psi}_i(x, t) = \int_0^1 \psi_i(Z, t) \tilde{P}(Z; x, t) dZ. \quad (5.63)$$

5.2.4 Formação e oxidação de Fuligem

Em motores diesel a formação de fuligem ocorre em ambientes de combustão na faixa de temperaturas de 1000 até 2800 K, pressões de 50 até 100 atm, e com suficiente ar em geral para queimar todo o combustível. As partículas resultantes podem ser caracterizadas pela quantidade total de fase condensada (relacionada com o crescimento das partículas de fuligem), pelo número de partículas de fuligem por unidade de volume (relacionada como a geração de partículas de fuligem) e pelo tamanho das partículas.

A formação de partículas de fuligem é onde surge o primeiro material em fase condensada a partir das moléculas de combustível devido à oxidação e/ou pirólise de produtos. Os produtos incluem vários hidrocarbonetos insaturados, particularmente acetileno e hidrocarbonetos aromáticos policíclicos. Estes dos tipos de moléculas são considerados os maiores precursores de fuligem na chama. As reações de condensação das espécies em fase gás de espécies levam à aparição das primeiras partículas de fuligem reconhecíveis. O crescimento da superfície de partículas inclui coagulação e agregação. O crescimento da superfície, mediante o qual o material da fase sólida é gerado, envolve o anexo de espécies da fase gás à superfície das partículas e sua incorporação na fase particulada. Estas fases de geração e crescimento de partículas constituem o processo de formação de fuligem. Em cada um destas fases o processo de oxidação pode ocorrer onde a fuligem ou precursores de fuligem são queimados na presença de espécies oxidantes para formar produtos gasosos como CO e CO₂.

A taxa de reações tais como oxidação de fuligem depende da difusão de reagentes nos produtos a partir da superfície, bem como da cinética das reações. Para partículas menores a 1 μm de diâmetro, a resistência à difusão é mínima. O processo de oxidação no cilindro do motor diesel é cineticamente controlado, uma vez que as partículas são de tamanhos mais pequenas deste limite.

A fuligem é formada em regiões de mistura rica na chama de difusão, e se a fuligem é ou não é emitida pelo motor, depende da competência entre formação de fuligem e oxidação de fuligem. Na simulação de formação e oxidação de fuligem há diferentes abordagens, e uma variante é utilizar o modelo de Hiroyasu (modelo empírico), acoplado com o modelo *Nagle and Strickland-Constable*-NSC (1962) para simular a oxidação. A produção de massa de fuligem (M_s) em uma célula computacional de acordo com o modelo de Hiroyasu, pode ser determinada da competição entre a taxa de formação de fuligem (\dot{M}_{sf}) e a taxa de oxidação de fuligem (\dot{M}_{so}), (Richards *et al.*, 2016), por

$$\frac{dM_s}{dt} = \dot{M}_{sf} - \dot{M}_{so}, \quad (5.64)$$

onde a taxa de formação é

$$\dot{M}_{sf} = M_{form}SF, \quad (5.65)$$

$$SF = A_{sf}P^{0,5}\exp(-E_{sf}/R_uT), \quad (5.66)$$

onde M_{form} é a massa da espécie de formação de fuligem (normalmente vapor de combustível), P é a pressão na célula, T é a temperatura na célula, E_{sf} é a energia de ativação, e A_{sf} é o fator pré exponencial de Arrhenius.

O modelo de oxidação NSC considera oxidação de carvão por dois mecanismos, onde as taxas de estes mecanismos dependem da química da superfície que envolva mais sítios reativos A e menos sítios reativos B . A taxa de reação (R_{tot}) em [mol/cm² s] é

$$R_{tot} = \frac{K_A P_{O_2}}{1 + K_Z P_{O_2}} X + K_B P_{O_2} (1 - X), \quad (5.67)$$

onde X é a proporção de sítios A dado por

$$X = \frac{P_{O_2}}{P_{O_2} + (K_T/K_B)}, \quad (5.68)$$

onde P_{O_2} é a pressão parcial do oxigênio, K são constantes da taxa para o carvão.

É assumido que as partículas de fuligem são esféricas que a área de superfície para oxidação é

$$S = N_{p,ful}\pi D_s^2 = \frac{6M_s}{\rho_s D_s}, \quad (5.69)$$

onde $N_{p,ful}$ é o número total de partículas de fuligem, D_s é o diâmetro nominal da partícula, M_s é massa total da partícula, e ρ_s é a massa específica da fuligem. A taxa de oxidação, incluindo um fator de escala (A_{so}), é obtida como

$$\dot{M}_{so} = A_{so} S R_{tot} M W_c = A_{so} \frac{6M_s}{\rho_s D_s} R_{tot} M W_c, \quad (5.70)$$

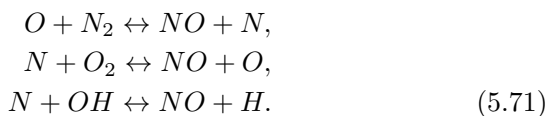
onde $M W_c$ é a massa molecular do carvão.

Usando as Equações (5.65) e (5.70), a Equação (5.64) pode se escrever como uma equação linear de primeira ordem, em termos da massa específica de espécies.

5.2.5 Formação de NOx

A principal fonte dos NOx é a oxidação do ar atmosférico. Os óxidos de nitrogénio são formados por meio de quatro mecanismos químicos que envolvem o nitrogénio do ar: o térmico (mecanismo Zeldovich) que domina a formação de NO em alta temperatura em uma faixa de razões de equivalência ampla, o Fenimore (mecanismo imediato) que é importante na combustão rica, o mecanismo intermediado por NO₂ que tem papel importante na produção de NO em combustão pobre em temperaturas baixas, e mecanismo NNH.

O mecanismo de Zeldovich estendido consiste em duas reações em cadeia, incluindo uma terceira reação. Este mecanismo é geralmente aceito em combustão de misturas perto da estequiometria combustível-ar, onde as reações de formação e destruição de NO a partir do nitrogénio molecular são



A taxa de formação de NO a partir das reações da Equação (5.71), é dada por

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{2R_1(1 - ([NO]/[NO]_e)^2)}{1 + ([NO]/[NO]_e)R_1/(R_2 + R_3)}, \quad (5.72)$$

onde $[]_e$ denota as concentrações em equilíbrio.

$$\begin{aligned} R_1 &= k_{1f}[O]_e[N_2]_e = k_{1r}[NO]_e[N]_e, \\ R_2 &= k_{2f}[N]_e[O_2]_e = k_{2r}[NO]_e[O]_e, \\ R_3 &= k_{3f}[N]_e[OH]_e = k_{3r}[NO]_e[H]_e. \end{aligned} \quad (5.73)$$

Considerando uma forte dependência da temperatura da taxa de formação de NO e $[NO]/[NO]_e \ll 1$, então o cálculo de NO formado pelo mecanismo térmico é dado pela seguinte relação

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_{1f}[O]_e[N_2]_e, \quad (5.74)$$

onde k_{1f} é coeficiente de taxa de avanço da reação $O+N_2 \rightarrow NO+N$.

As considerações de equilíbrio químico indicam que em gases queimados em temperaturas típicas de chama, a razão NO_2/NO pode se negligenciar, os dados experimentais para os motores diesel mostram que a razão pode ser da ordem de 10 até 30 percentual do total das emissões de óxidos de nitrogênio na exaustão.

Na combustão não pré-misturada há processos físicos adicionais como evaporação e mistura que pode produzir uma ampla gama de composições locais numa faixa ampla de estequiometria, desta forma, a mistura total pode ser estequiométrica, pode ter região bastante rica ou bastante pobre, e isto aumenta a complexidade do problema da formação de poluentes.

O mecanismo térmico domina a formação de NO na combustão em alta temperatura em uma faixa de razões de equivalência ampla, enquanto o mecanismo Fenimore é importante na combustão rica. O mecanismo intermediado por N_2O parece ter um papel importante na produção de NO em combustão muito pobres e temperaturas baixas, e o mecanismo NNH é o mais novo integrado às rotas conhecidas de formação de NO, (Turns, 2000).

5.2.6 Modelo de cinética química detalhada

O algoritmo utilizado pelo CONVERGE, denominado SAGE permite o uso de cinética química detalhada em simulações de combustão com um conjunto de arquivos de entrada no formato CHEMKIN, para a definição de mecanismos cinéticos. O mecanismo cinético de reação é descrito pelas Equações (5.2) a (5.4), onde o coeficiente de taxa para frente k_{fi} é expresso pela forma de Arrhenius como

$$k_{fi} = A_i T^{b_i} \exp(-E_i/R_u T), \quad (5.75)$$

onde A_i é o fator pré-exponencial, b_i é o expoente de temperatura, E_i é a energia de ativação e R_u é a constante universal dos gases. O coeficiente de taxa reverso é obtido da Equação (5.5), e o coeficiente de equilíbrio é determinado das propriedades termodinâmicas como

$$K_c = K_{pr} \left(\frac{P_{atm}}{RT} \right)^{\sum_{m=1}^M \nu_{mr}}, \quad (5.76)$$

onde P_{atm} é a pressão atmosférica, R é a constante do gás, T é a temperatura. A constante de equilíbrio K_{pr} é obtida com a seguinte relação

$$K_{pr} = \exp \left(\frac{\Delta S_r^o}{R} - \frac{\Delta H_r^o}{RT} \right), \quad (5.77)$$

onde o Δ é referido à mudança que ocorre ao passar completamente de reagentes a produtos na r^{th} reação, e S e H denotam a entropia e entalpia respetivamente.

O modelo de cinética química detalhada permite a solução de reações dependentes da pressão e permite reações de terceiro corpo especificando eficiências terceiro corpo para diferentes espécies.

As equações de conservação de massa e energia podem ser resolvidas para uma célula computacional dada, onde as equações são

$$\frac{d[X_j]}{dt} = \dot{w}_j, \quad (5.78)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{V \frac{dP}{dt} - \sum_j (\bar{h}_j \dot{w}_j)}{\sum_j ([X_j] \bar{c}_{p,j})}, \quad (5.79)$$

onde \dot{w}_j é obtido da Equação (5.3), \bar{h}_j e $\bar{c}_{p,j}$ são a entalpia molar específica e o calor específico molar a pressão constante das espécies j , respetivamente. A temperatura obtida da Equação (5.79) é usada para atualizar os coeficientes de taxa, mas não é usada para atualizar a temperatura da célula do solver CFD, (Senecal *et al.*, 2003).

O solver de química detalhada SAGE, calcula as taxas de reação para cada reação elementar, em tanto que o solver de CFD resolve as equações de transporte.

5.2.7 Trabalhos de simulação numérica de combustão

A combustão de spray diesel tem sido analisada desde o ponto de vista experimental e numérico, onde são usados diferentes modelos de quebra para o spray, diferentes combustíveis e mecanismos cinéticos para a combustão. As variáveis que têm influência na combustão de spray em motores de ignição por compressão são muitas, desde as relacionadas com o sistema de injeção de combustível até as

condições de combustão, e em cada pesquisa feita são consideradas algumas de elas.

A simulação de combustão de spray em uma câmara a volume constante para 4 substitutos de combustível diesel onde um de eles é n-dodecano, em condições de operação do motor de ignição por compressão considerando como variáveis do modelo a concentração de O_2 e a temperatura do ambiente, usando LES no software *KIVA3v*, foi feita por (Zhou *et al.*, 2015), onde é usado para quebra de gota o modelo KH-RT obtendo como resultado que o atraso de ignição e o comprimento de descolamento de chama é dependente das variáveis do modelo usadas.

A simulação numérica de combustão de spray de n-dodecano usando também LES foi feita por (Gong *et al.*, 2014) usando um mecanismo cinético detalhado em *OpemFOAM* para duas condições de temperatura ambiente, onde é analisado o atraso de ignição, a estrutura da chama e localização da ignição, identificando dois estados de ignição, um de eles que ocorre em mistura pobre e outro em mistura rica.

As características do spray como penetração e ângulo e a superfície da chama, são analisadas experimentalmente para spray de combustível diesel e gasolina em condições não evaporativas e evaporativas por (Kim *et al.*, 2013), onde foram visualizadas imagens da evolução da chama de cada combustível e as características do spray.

Na análise experimental e numérica de combustão de biodiesel de colza, reportada por (Lesnik *et al.*, 2013), usando *AVL Fire* com abordagem Lagrangiana/Euleriana e modelo de turbulência $k - \varepsilon$, foi observado que o baixo poder calorífico do biodiesel ao comparado com diesel, contribui a diminuir a potência e o torque do motor, e que com o biodiesel as emissões de CO são diminuídas.

A influência da pressão de injeção de biodiesel de palma na penetração de spray, no comprimento de descolamento de chama e na formação e oxidação de fuligem é observada de forma experimental por (Kuti *et al.*, 2013), usando volume constante e ambiente quiescente.

A combustão do biodiesel de palma e soja foi estudada por (Ismail *et al.*, 2012), em um motor a velocidade constante e feita a simulação em *OpemFOAM* com o modelo de turbulência $k - \varepsilon$ *RNG*, um mecanismo cinético para $C_{14}H_{30}$ de 113 espécies, modelo de quebra KH-RT. Foram obtidos bons resultados na predição do atraso de ignição, pressão no cilindro, taxa de liberação de calor,

onde o biodiesel produz gotas de maior tamanho que o diesel, maior penetração de spray e baixa taxa de evaporação.

Para a análise da influencia da razão de *swirl* foi feita a simulação numérica de combustão em um motor de ignição por compressão por (Sreenivasulu *et al.*, 2012), com o objetivo de obter a pressão, temperatura e taxa de liberação de calor usando o software *VECTIS* com modelo de turbulência $k - \varepsilon$ *RNG* e modelo de quebra KH-RT, observando que o pico de maior pressão é para uma razão de *swirl* de 1,5 o qual contribui com uma melhor formação de mistura.

De forma experimental em condições de alta temperatura e alta pressão e ambiente quiescente foram feitos por (Payri *et al.*, 2012) testes de combustão de spray usando n-dodecano, onde é controlada a temperatura de injeção de combustível e avaliar a influencia na penetração de spray, comprimento de descolamento de chama e atraso de ignição.

(Som *et al.*, 2011) analisou numericamente e experimentalmente a penetração de spray, penetração de vapor, atraso de ignição, comprimento de descolagem da chama e formação de fuligem. Os resultados das simulações mostraram uma boa concordância quando comparados aos dados de simulação, realizada usando volume constante em condições do motor de ignição por compressão com turbulência em *Converge CFD* e como combustível n-dodecano, modelo de turbulência $k - \varepsilon$ *RNG*, modelo de quebra KH-RT, com um mecanismo cinético de 103 espécies e 370 reações.

5.3 MODELAGEM DE COMBUSTÃO E METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

As características do motor simulado são relacionadas na seção 3.3.1, e na Tabela 6 estão cada uma das especificações do motor. A geometria completa do motor simulado é mostrada na Fig. 9, e esta geometria é dividida em três regiões para a simulação de combustão de spray, as quais são: admissão, exaustão e cilindro. Na região do cilindro a qual tem como fronteiras o pistão, parede do cilindro, cabeçote e válvulas, é identificado o injetor de cinco (5) furos, como pode se ver na Fig. 37a, onde é detalhado em qual direção sai cada um dos jatos do injetor.

5.3.1 Injeção de combustível e combustão

As características do sistema de injeção e da injeção de combustível são descritas na seção 4.3.1. Para simulação de combustão

de spray são feitas simulações de combustível diesel em 1800 rpm com temperatura de combustível na injeção de 308,5 K e em 2100 rpm com temperatura de combustível na injeção de 308 K, de acordo com a Tabela 10. Para a mistura 80s20d é feita a simulação de 1800 rpm com temperatura de combustível na injeção de 365,5 K e em 2100 rpm com temperatura de combustível na injeção de 365 K.

5.3.2 Características do método numérico

A simulação de combustão de spray é iniciada no ângulo de manivela de 20° antes do PMS até 360°, onde termina a fase de exaustão. Para os dois combustíveis (diesel e mistura 80s20d), a simulação de combustão de spray é feita para as velocidades de 1800 e 2100 rpm. É usado um tempo mínimo e um tempo máximo de acordo com a Tabela 7, com as características do método numérico descritas na secção 4.3.2, e com as propriedades termofísicas dos combustíveis descritas na secção 4.2.6.1. É usado o mecanismo cinético de n-dodecano de 106 espécies e 420 reações, o qual é obtido da redução do mecanismo cinético para n-alcenos de 2755 espécies e 11173 reações desenvolvido por *Lawrence Livermore National Laboratory*, (Luo *et al.*, 2014). É usado o solver de cinética química detalhada SAGE o qual permite o uso da cinética química detalhadas em simulações de combustão com arquivos em formato CHEMKIN, para a definição de mecanismos cinéticos. Para as emissões de NOx é usado o modelo estendido de Zeldovich, para fuligem é usado o modelo de Hiroyasu.

Os parâmetros analisados para convergência de malha nas simulações de combustão são a temperatura máxima e a penetração do vapor. A simulação é feita para o motor com combustível diesel em 1800 rpm usando como malha base 7, 5 e 3 mm e com AMR no cilindro de escala 5.

Para a temperatura na faixa de ângulo de manivela analisada verifica-se na Fig. 54a, que a simulação feita com a malha base grosseira (7 mm) apresenta diferenças nos valores deste parâmetro em relação aos valores de temperatura das simulações com 5 e 3 mm. A análise mostra que os valores de temperatura para o caso das simulações com 5 e 3 mm não são significativamente diferentes, portanto é possível considerar que com estes dois tamanhos de malha base os resultados são quase idênticos.

Na análise da penetração de vapor de combustível de acordo com a Fig. 54b, observa-se que existe uma diferença nos valores deste parâmetro para a simulação com malha base de 7 mm e também há

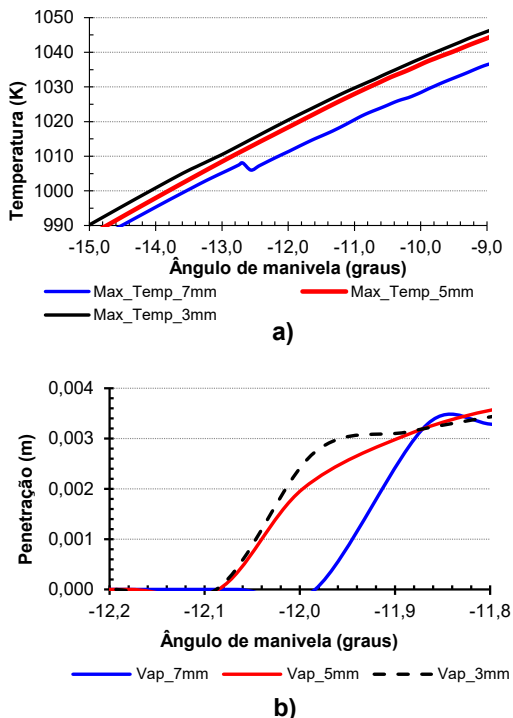


Figura 54 – a) Penetração do líquido, b) Penetração de vapor em função do ângulo de manivela para o motor em 1800 rpm e três malha base. (Fonte: Autor)

diferença no valor do ângulo de manivela onde inicia a aparição de vapor de combustível, ao comparado com os casos onde foi usada malha base de 5 e 3 mm. Quando é usada malha base de 5 e 3 mm o ângulo de manivela no qual aparece o vapor de combustível no cilindro é quase idêntico e o comportamento da linha de penetração de vapor nestes dois casos é muito similar.

A quantidade de volumes em cada caso é analisada para o ângulo de 9° antes do PMS obtendo as seguintes quantidades: para malha base de 7 mm se têm 199000 volumes, para 5 mm se têm 327000 volumes e para 3 mm se têm 926000 volumes.

Considerando que o tempo computacional e a capacidade do computador são limitados neste caso de simulação de combustão pelo uso do mecanismo cinético, é selecionada a malha base de 5

mm para usar nas simulações.

Os parâmetros usados na simulação para a malha são os seguintes: é definida uma malha base de 5,0 mm para todos os eixos, e com esta malha base é feito um refino de malha de tamanho 0,15625 mm com a metodologia de refinamento de malha AMR baseado nas flutuações da velocidade e da temperatura desde -16° até -3° , usando *fixed embedding* em todo o cilindro é refinada a malha de 0,625 mm iniciando em -3° até 30° , e depois é feito um refino de 1,25 mm com *fixed embedding* no cilindro que inicia em 30° até 180° .

A simulação feita no computador descrito na secção 3.3.2 e simulando em paralelo tem um tempo médio para cada caso simulado de 126,9 h.

5.3.3 Condições de contorno do modelo

Para cada uma das paredes que formam as fronteiras do sistema, a temperatura que foi usada como condição de contorno corresponde à temperatura média do componente sólido obtidas como descrito na secção 3.3.3.

O pistão é definido como fronteira com movimento e para o movimento das válvulas, a elevação da válvula foi dada ao software em função de ângulo de manivela.

5.3.4 Condições iniciais do modelo

Como condição inicial para a simulação de combustão de spray é usado o arquivo gerado na simulação de admissão e compressão chamado *map.out* (gerado em -20°).

5.4 RESULTADOS E ANÁLISE

Os resultados obtidos na simulação de combustão de spray para os dois combustíveis nas duas velocidades do motor, são apresentados nesta secção. No caso da pressão no interior do cilindro, é comparada com dados experimentais obtidos por (Garzón, 2017) na bancada dinamométrica do motor Yanmar existente no LAB-CET. As características que identificam o spray e a combustão são relacionadas e comparadas para cada caso, fazendo uma análise do comportamento de estas variáveis. Nas diferentes gráficas e figuras, em cada uma das velocidades do motor o tipo de combustível é denotado como *d* para diesel e como *m* para mistura 80s20d. Nas figuras os dados obtidos experimentalmente serão denotados como *EXP*, os

dados obtidos com modelos zero dimensionais são denotados como $0D$ e os dados obtidos da simulação multidimensional são denotados como MD .

5.4.1 Pressão no cilindro

No cilindro, depois da injeção de combustível (-15°) a pressão diminui um pouco pelo efeito de arrefecimento do combustível líquido injetado. De acordo com a Fig. 55, para os dois combustíveis são obtidos bons níveis de comparação entre os dados experimentais e numéricos na pressão, onde a diferença entre os dados é de aproximadamente 4%, e o desvio do ângulo de manivela onde ocorre a máxima pressão é de $\pm 0,5^\circ$ para o combustível diesel e de $\pm 1,0^\circ$ para a mistura 80s20d.

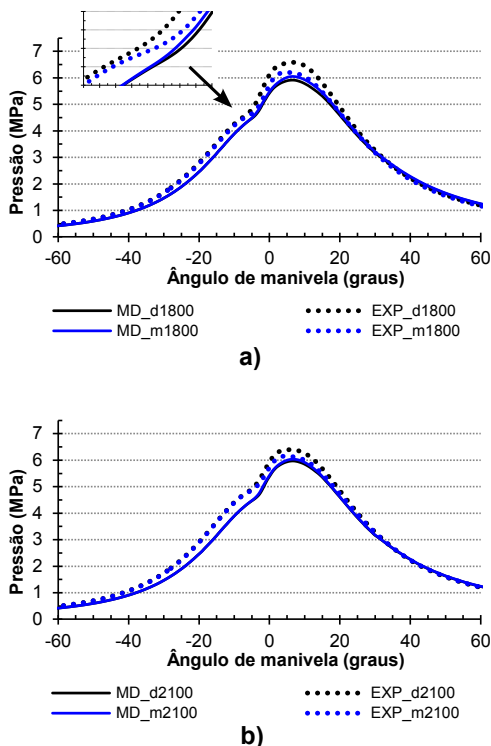


Figura 55 – Pressão média no interior do cilindro em função do ângulo de manivela. a) Para 1800 rpm, b) Para 2100 rpm. (Fonte: Autor)

O ângulo de início da mudança no declive da linha de pressão depois da ignição tem diferença entre os dados experimentais e os dados numéricos. As linhas de pressão são analisadas na faixa do ângulo onde se tem a mudança de declive, obtendo o ponto mínimo da primeira derivada para identificar o ângulo deste ponto mínimo como o início da mudança do declive. Com esta análise se obtém que para 1800 rpm a linha de pressão experimental do diesel inicia primeiro a mudança com uma diferença de $1,8^\circ$ em relação aos dados numéricos, e para a mistura 80s20d a mudança inicia primeiro na pressão numérica com uma diferença de $0,3^\circ$ em relação aos dados experimentais. Este comportamento pode se ver na Fig. 55a para o detalhe feito no ponto de mudança do declive. Para 2100 rpm a linha de pressão experimental do diesel inicia primeiro a mudança com uma diferença de $2,2^\circ$ em relação aos dados numéricos, e para a mistura 80s20d a mudança inicia primeiro na pressão experimental com uma diferença de $0,4^\circ$ em relação aos dados numéricos.

O declive da pressão depois da ignição mostra resultados coerentes entre os dados numéricos e os dados experimentais, o qual mostra uma boa predição da combustão não pré-misturada.

Os dados numéricos para os dois combustíveis mostram que estão razoavelmente de acordo com os dados experimentais, onde para as diferentes condições a mistura 80s20d mostra uma ignição perto ao diesel, e o pico de pressão numérico é menor.

Obter características similares em estas propriedades é um indicio que o método numérico e o modelo usado neste trabalho é plausível de se utilizar para obter uma análise das características de spray e combustão da mistura.

5.4.2 Temperatura no cilindro

A temperatura obtida na simulação multidimensional e com modelo zero dimensional no cilindro (Garzón, 2017), apresenta mudança no declive depois do início da ignição, como mostra a Fig. 56. Os picos de temperatura não apresentam diferença, mas sim apresenta desvio do pico de temperatura no ângulo de manivela. Também é possível ver na Fig. 56 que a temperatura numérica é maior em combustão não pré-misturada, o qual é um indicio da baixa taxa de evaporação na combustão pré-misturada e alta taxa de evaporação na segunda fase da combustão.

Nas imagens de distribuição de temperatura para o jato 1, Fig. 57a, pode se ver a evolução da chama, onde a color azul es-

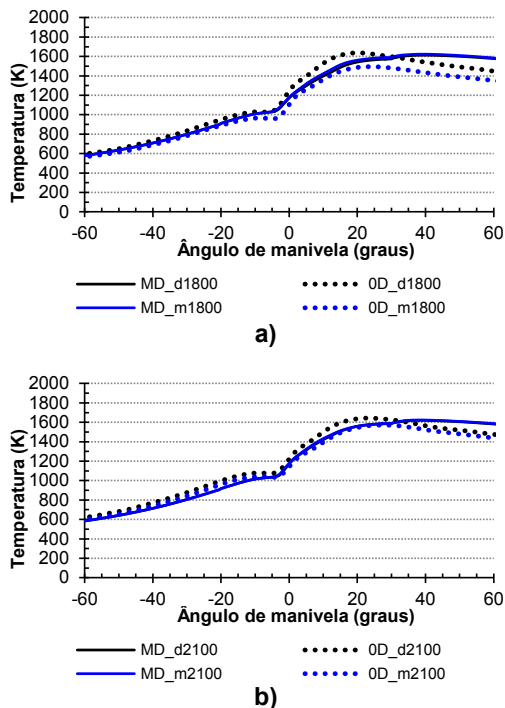


Figura 56 – Temperatura média no interior do cilindro em função do ângulo de manivela. a) Para 1800 rpm, b) Para 2100 rpm. (Fonte: Autor)

curo representa o spray de combustível. Em estas figuras, para a distribuição de temperatura no spray o contorno branco denota a temperatura de 2000 K, e nas figuras de distribuição de fração de mistura (Z) o contorno branco denota a fração de mistura estequiométrica (Z_{st}). Desde o início da ignição, a temperatura da zona de reação propaga-se em torno do jato até uma distância na frente do injetor, num tempo de transição onde a chama estabiliza-se em uma posição média (comprimento de descolamento da chama).

A estrutura da chama é consistente com estruturas descritas em imagens experimentais, mas a diferença é que os dados experimentais são obtidos em ambiente quiescente. Nas Figs. 57 pode se ver que para o caso da simulação é considerado o efeito da turbulência, e por tanto devido aos efeitos dinâmicos o jato de combustível é deslocado para o lado esquerdo, o que está de acordo como a direção

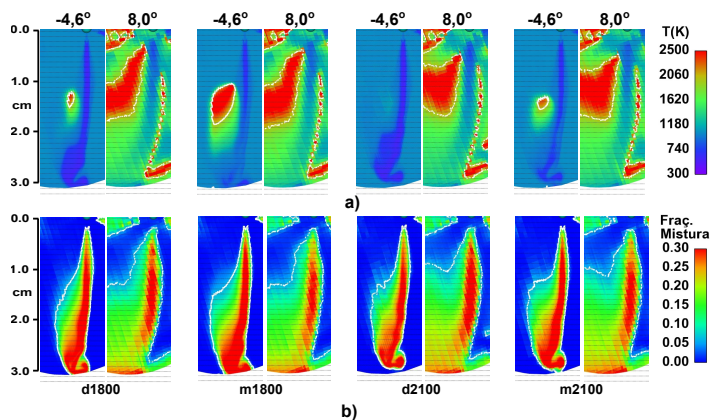


Figura 57 – Para o jato 1 em diferentes ângulos de manivela. a) Perfil de temperatura. b) Perfil de fração de mistura. (Fonte: Autor)

do escoamento em torno do jato como pode se ver na Fig. 21, perto do ângulo de injeção. Na faixa da duração da injeção, a razão de *swirl* apresenta o maior pico, aproximadamente 2,1, o qual facilita o processo de mistura combustível-ar no interior do cilindro pela interação do ar circundante com o spray de combustível.

Para o ângulo de $-4,6^\circ$ é possível ver na Fig. 57 um ponto de auto ignição perto do jato em uma região rica ($Z > Z_{st}$) e desde este ponto é obtida a propagação da chama acoplando a ignição de baixa temperatura, tentando estabilizar a chama pela propagação a jusante e a montante gerando combustão em torno do jato de combustível como é visto em $8,0^\circ$, onde a combustão não ocorre na região mais rica.

5.4.3 Taxa de liberação de calor

Nas figuras 58 é mostrada a taxa de liberação de calor (HRR) obtida no *Converge CFD* e a obtida usando os dados experimentais de pressão, (Garzón, 2017). A taxa de HR experimental é obtida usando a curva de pressão experimental no cilindro e sua derivada no tempo. Nestas figuras, pode se ver que a mistura combustível-ar é submetida a dois estados de ignição com dois picos maiores de taxa de liberação de calor. A ignição do combustível ocorre nesta região devido à alta temperatura local, e as reações na mistura pobre produz início do primer estado de ignição na mistura rica. De

forma ilustrativa, a evolução da estrutura da chama é mostrada em imagens para seis (6) ângulos diferentes do ciclo, iniciando em -5° , o que corresponde a um instante depois da ignição, e o plano das imagens esta a 7,6 mm do cabeçote. As quatro primeiras imagens da evolução da chama estão localizadas no interior da taça do pistão e as duas imagens finais correspondem a uma posição no volume entre o pistão e o cabeçote.

A taxa de liberação de calor entre o ângulo de -5° e 0° é de um valor alto como pode se ver na Fig. 58, o que é por motivo da mistura facilitada pelo *swirl* desde o momento da injeção, já que como pode se ver na Fig. 19 a razão de *swirl* nesta faixa é a mais alta do ciclo com um valor de 2,1 aproximadamente. Depois de 5° é obtido um aumento de taxa de liberação de calor de novo, e em este caso abrange um ângulo maior o qual pode ser explicado pela formação de mistura combustível-ar no interior da taça do pistão e então o combustível nesta região está usando o oxigênio disponível (em 4° a chama ainda não abrange a totalidade do volume da taça como pode se ver na Fig. 58a).

Na Fig. 58 é feita a comparação da taxa de HR da simulação multidimensional e zero dimensional para as duas velocidades do motor e para o combustível diesel e mistura 80s20d, mostrando que a tendência da taxa de HR da simulação multidimensional é similar à zero dimensional, o qual permite concluir que o modelo multidimensional representa de forma consistente o motor de ignição por compressão Yanmar. No pico de taxa de HR na fase pré-misturada são obtidos valores menores para o caso multidimensional, o que pode ser devido à incerteza na representação adequada do sistema de injeção, principalmente na forma da taxa de injeção, a qual no foi possível obter experimentalmente.

Nas Figs. 58a e 58b para a faixa de -15° ate $-6,0^\circ$, a taxa de HR zero dimensional mostra valores negativos de ate -100 kW (perda de calor). A taxa de HR multidimensional tem valores negativos nesta mesma faixa, mas são de menor valor que os dados zero dimensionais, e por tanto estes valores negativos pequenos nas figuras não estão representados devido à escala usada para o eixo de Taxa de HR. Com o objetivo de obter uma comparação, é usada a curva de pressão obtida na simulação multidimensional (Fig. 55) e com ela é feito o mesmo procedimento que para a pressão experimental, obtendo uma taxa de HR com a modelagem zero dimensional (denotada nas figuras como MD-0D), e é comparada com a taxa de HR obtida com a pressão experimental (0D), Fig. 59. Ao fazer o

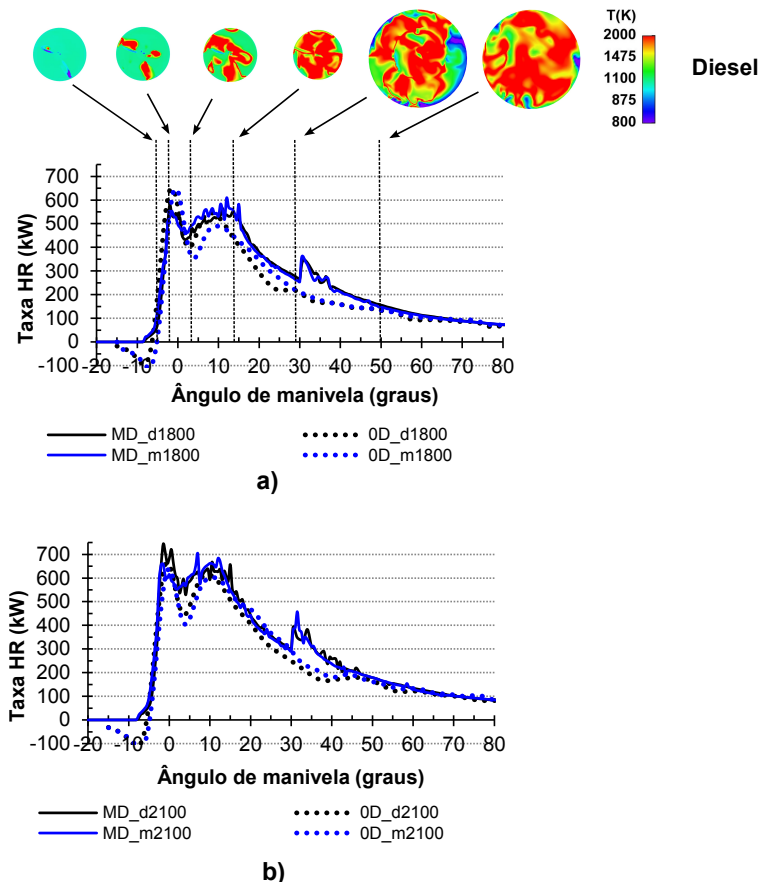


Figura 58 – Taxa de liberação de calor multidimensional e zero dimensional em função do ângulo de manivela. a) Para 1800 rpm, b) Para 2100 rpm. (Fonte: Autor)

mesmo procedimento de obtenção de taxa de HR com a pressão da simulação multidimensional, são obtidos valores negativos (-28 kW) na faixa considerada, por tanto é possível concluir que a diferença nos valores negativos de taxa de HR mostrados nas Figs. 58 é devida a que o algoritmo usado para a análise dos dados de pressão experimental produz valores negativos grandes tanto para a pressão experimental como para a pressão obtida de forma multidimensional. Os valores de taxa de HR negativos na faixa antes da ignição

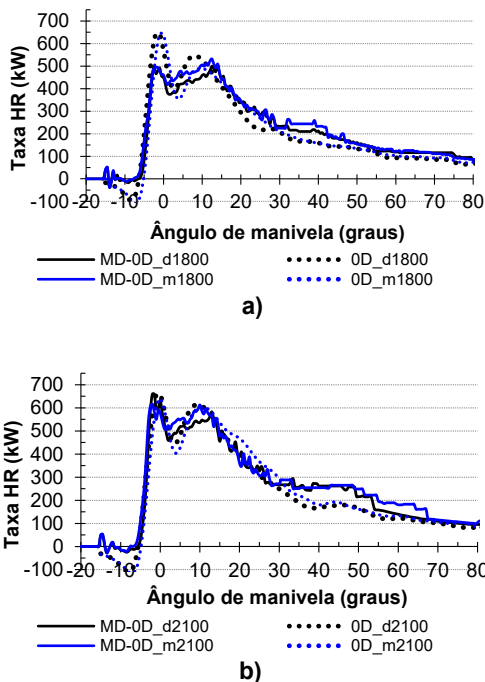


Figura 59 – Taxa de liberação de calor numérica e zero dimensional em função do ângulo de manivela. a) Para 1800 rpm, b) Para 2100 rpm. (Fonte: Autor)

é devido à transferência de calor para o combustível injetado usado no aquecimento e na evaporação.

O período de combustão não pré-misturada é ligeiramente maior para a mistura 80s20d que para o diesel em 1800 rpm, mas o comportamento da combustão não muda muito. A taxa de HR em 2100 rpm para o combustível diesel e para a mistura 80s20d têm o mesmo comportamento em combustão pré-misturada e em não pré-misturada.

Para o motor em baixa carga o período de injeção, em tempo, é menor que para alta carga (1800 rpm), e por tanto maior massa de combustível é injetado antes do início da combustão dando um pico da taxa de HR maior em fase pré-misturada, quando comparado com alta carga. O requerimento de massa de combustível por ciclo é maior em alta carga como é relacionado na secção 4.3.1, e pode

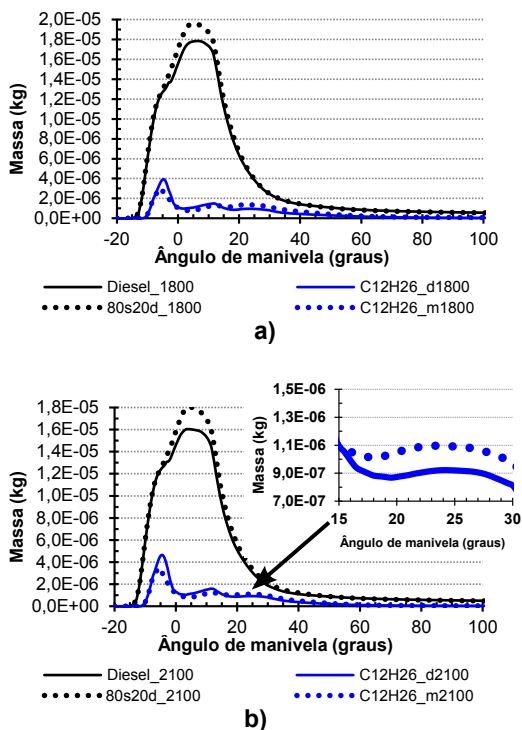


Figura 60 – Massa de combustível líquido e vapor em função do ângulo de manivela. a) Para 1800 rpm. b) Para 2100 rpm. (Fonte: Autor)

se ver na Fig. 60 para a quantidade de combustível líquido (diesel ou 80s20d) e quantidades de combustível em vapor ($C_{12}H_{26}$) em função do ângulo de manivela.

Nestas figuras, para a velocidade de 2100 rpm a quantidade de combustível em vapor na fase pré-misturada é maior que para 1800 rpm o qual concorda com a taxa de HR da Fig. 58b. O combustível em vapor para o diesel e para 80s20d têm um comportamento igual nas duas velocidades do motor.

O pico de combustão pré-misturada é afetado pela taxa de evaporação e pelo atraso de ignição onde o combustível com alta taxa de evaporação tem grande pico de combustão pré-misturada. Um grande atraso de ignição leva a que seja evaporada uma maior quantidade de combustível antes do início da combustão obtendo

alta quantidade de combustível queimado em curto tempo.

A chama pré-misturada pode se ver que ocorre ao longo do eixo do spray, no lado contrario onde o ar circundante atinge o spray, como no caso do jato 1 da Fig. 57, onde pode se observar um dos primeiros pontos/focos de ignição no lado esquerdo do spray, e também a chama espalha-se nos pontos onde o spray atinge superfícies sólidas. Para combustão do diesel e da mistura 80s20d nas Figs. 58 é observado um pico de taxa de HR em aproximadamente 10° , a qual é a zona de combustão controlada pela mistura, e em 8° pode se ver que a chama é desenvolvida a lado e lado do eixo do spray, Fig. 57.

A taxa de HR da simulação multidimensional para os dois combustíveis em 30° da manivela apresenta um aumento, e para os dados zero dimensionais pode se ver que neste ponto muda seu declive. Este comportamento no aumento da taxa de HR é devido a combustão de uma quantidade de combustível maior que foi evaporada antes de este ângulo, como pode se ver nas Figs. 60, e de forma mais específica no detalhe feito na Fig. 60b. Antes de 30° no detalhe feito na Fig. 60b, para a massa de vapor se pode ver que a quantidade de vapor de combustível aumenta, ainda quando existe um processo de combustão e este vapor de combustível ao ser queimado gera o aumento da taxa de HR.

Nos motores de ignição por compressão a maior eficiência energética é obtida quando se tem grande taxa de liberação de calor perto do PMS. Uma prolongada taxa de HR na expansão leva a maior perda de calor pela transferência de calor entre os gases quentes e as paredes da câmara de combustão.

A duração da combustão é definida como a faixa desde o inicio da combustão até o 90% de massa de combustível queimada, onde é considerado que ocorre o final da combustão. Em termos de duração total da combustão ou velocidade, a mistura 80s20d tem igual velocidade de combustão quando comparado com o diesel devido ao aquecimento que é feito na mistura antes da injeção. Para as velocidades do motor o 90% da massa queimada é obtida em um ângulo de 19° , o que representa 4° depois do fim da injeção.

5.4.4 Atraso de ignição

De acordo à Tabela 15, o período de atraso de ignição (ID) obtido da análise da pressão experimental (Garzón, 2017), é mais curto para o combustível diesel que para a mistura 80s20d o qual

pode ser atribuído às propriedades termofísicas do diesel e à composição química. O ID devido às propriedades termofísicas ocorre porque estas propriedades controlam a quebra da gota, taxa de evaporação, penetração do spray, penetração de vapor e a formação de mistura combustível-ar antes da ignição. Os efeitos químicos no ID são chamados de atraso químico, e é controlado pela composição molecular do combustível. Os combustíveis com altos níveis de insaturação tem grandes ID já que a ligação dupla de carbono é mais forte que a ligação simples, e mais energia é requerida para quebrar a ligação e iniciar o processo de oxidação.

A ignição na simulação multidimensional é definida como o ângulo de manivela, ou tempo, no qual a temperatura máxima no domínio atinge um valor igual à metade do aumento de temperatura total do processo de combustão no domínio ($T_{ign} = (T_{amb} + T_{max})/2$). Na análise feita por (Som *et al.*, 2011), o atraso de ignição de simulação feita em *Converge CFD* é definido como o tempo desde o início da injeção até o tempo quando a temperatura em qualquer célula computacional é observada pela primeira vez por acima de 2000 K, o qual para as simulações feitas no presente trabalho estão muito perto ao critério usado.

De acordo ao critério de temperatura, o valor do ID nas simulações é dado na Tabela 15 e comparado com os dados de ID obtidos da curva de pressão experimental, concluindo que o ID numérico e experimental não apresentam diferenças significativas. Com o objetivo de validar o critério numérico de início da ignição, é aproveitado o mecanismo cinético usado na simulação para fazer uma análise da formação da espécie OH, para definir o ângulo onde o declive da linha de massa da espécie OH vs ângulo de manivela, muda para aumentar rápido a massa da espécie OH. A espécie OH inicia sua aparição depois da injeção com um declive pequeno, mas este declive muda de forma quase vertical aumentando a massa rapidamente, em um ângulo especificado na Tabela 15 para cada tipo de combustível e velocidade do motor. Os resultados mostram que o tempo no qual inicia o aumento rápido da massa da espécie OH concorda com o momento de ignição numérica mostrado na Fig. 61, o qual garante que o critério numérico usado para definir a ignição é correto.

O ID numérico, de acordo à Tabela 15, é menor para a mistura 80s20d do que para o combustível diesel, pelo qual foi feita a seguinte análise para saber o que contribui a este comportamento na simulação: é analisada a massa de vapor de combustível quando se tem combustão (Fig. 60), e é possível ver que nas duas veloci-

Tabela 15 – Temperatura de ignição e atraso de ignição para diesel e para mistura 80s20d. (Fonte: Autor)

| Item | d1800 | m1800 | d2100 | m2100 |
|----------------------------|-------|-------|-------|-------|
| Temp. de ignição-Num. [K] | 1896 | 1903 | 1897 | 1900 |
| Atraso de ignição-Exp. [°] | 7,5 | 8,5 | 8,5 | 9,5 |
| Atraso de ignição-Num. [°] | 9,9 | 9,3 | 10,6 | 10,2 |
| Âng. aumento massa OH [°] | -5,2 | -5,5 | -4,5 | -5,0 |

dades do motor, para a mistura 80s20d a massa de vapor de combustível começa a diminuir mais rápido do que para o combustível diesel. A diminuição inicia em -6° , ou seja que o vapor de combustível ($C_{12}H_{26}$) depois deste tempo é transformado em outras espécies com maior rapidez para a mistura 80s20d. Ao analisar a massa de combustível evaporada quando não se tem combustão (Fig. 45), na faixa de -8° a -5° pode se ver que para a mistura 80s20d aquecida antes da injeção, a massa de vapor é maior que para o diesel, concluindo que a mistura 80s20d tem taxa de evaporação maior que o diesel, por tanto pode se ver que quando se tem combustão, esta diminuição da massa de vapor de combustível para a mistura 80s20d significa que o vapor é decomposto em outras espécies mais rápido também. Mais um indicio se obtém ao analisar a fração de massa queimada na faixa de -9° a -5° , e é obtido que a fração de massa queimada é maior para a mistura 80s20d que para o diesel, o que quer dizer que o vapor de combustível na mistura 80s20d é decomposto mais rápido que no diesel. A diferença no comportamento da evaporação de combustível e posterior transformação de vapor em outras espécies na mistura, sendo mais rápido este processo para a mistura 80s20d que para o diesel, pode ser atribuída à menor entalpia de vaporização que tem a mistura 80s20d no momento da injeção ($T=365$ K), em relação ao diesel que é injetado à temperatura de 308 K ($\Delta H_{80s20d}=265000$ J/kg, e $\Delta H_{diesel}=323000$ J/kg), e este parâmetro faz que o atraso de ignição seja menor para a mistura 80s20d em relação ao diesel.

Como pode se ver na Fig. 61, a ignição ocorre simultaneamente em vários pontos e tem lugar em uma região do cilindro onde a fração de mistura (Z) é maior à fração de mistura estequiométrica ($Z > Z_{st}$) ou região rica, e depois a combustão estende-se à região de mistura pobre e estequiométrica. Na Fig. 61, o contorno vermelho representa a zona onde é obtida temperatura de ignição e o contorno preto corresponde a $Z = Z_{st} = 0,062$. A ignição para

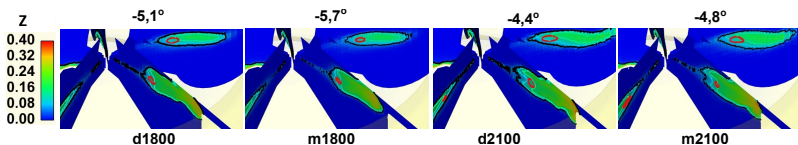


Figura 61 – Pontos de ignição em três jatos de combustível. (Fonte: Autor)

todos os casos, ocorre em uma região de $0,095 < Z < 0,13$, de acordo a os contornos de fração de mistura gerados em cada jato.

A redução de ID ocorre em alta carga no motor, e para baixa carga o atraso é maior. Em altas cargas o spray tem um melhor uso do ar circundante pela alta penetração do spray reduzindo assim o atraso físico com melhor atomização o que facilita a evaporação.

O ID é fortemente dependente da temperatura ambiente, onde um aumento na temperatura resulta em diminuição de ID devido ao aquecimento rápido do spray levando a uma rápida evaporação e formação de mistura, ao igual que pelo aumento na reatividade química. No caso da mistura 80s20d, o combustível é injetado a maior temperatura que o combustível diesel, o qual contribui pra que não tenha um ID grande.

De acordo com pesquisas feitas por (Zhou *et al.*, 2015), a concentração de radicais OH é maior nas zonas de alta temperatura, onde as reações são mais intensas, e para a simulação feita para diesel e mistura 80s20d pode se ver na Fig. 62 ao analisar os pontos de ignição dos jatos 1 e 2 em aproximadamente 2° depois do inicio da ignição, que a concentração de OH é maior onde a temperatura é mais alta, o qual concorda com validações experimentais feitas por pesquisadores.

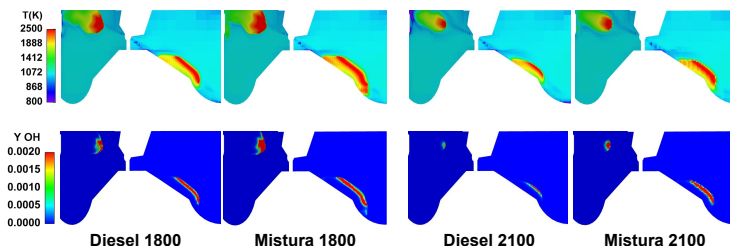


Figura 62 – Contornos de temperatura e de OH para dois jatos de combustível em $-3,0^\circ$. (Fonte: Autor)

As diferenças no ID entre o obtido experimentalmente e o numérico pode ser influenciado pelo modelo de quebra usado, (Som & Aggarwal, 2010). Desde o momento de ignição, a evolução da chama pode se ver na Fig. 58.

5.4.5 Estrutura da chama

A combustão em motores diesel é caracterizada por dois estados de chama parcialmente pré-misturada, de acordo como o modelo conceptual de (Dec, 1997). A combustão diesel ocorre através de uma chama rica pré-misturada perto da região de estabilização e uma chama não pré-misturada estabilizada mais jusante.

O líquido injetado é atomizado e evaporado, e arrasta ar quente levando à formação da mistura combustível-ar e a auto ignição. Depois da ignição, a chama é desenvolvida e é estabilizada em uma região rica em combustível. A combustão perto do borde de ataque desta chama é caracterizada por uma combustão rica pré misturada, pelo que o combustível é parcialmente oxidado para formar produtos ou espécies de combustíveis principalmente CO, H₂ e hidrocarbonetos intermediários como C₂H₂ os quais são transportados para ser consumidos na chama de difusão na periferia do jato. Desta forma os produtos da combustão rica pré-misturada e o ar circundante forma a chama de difusão.

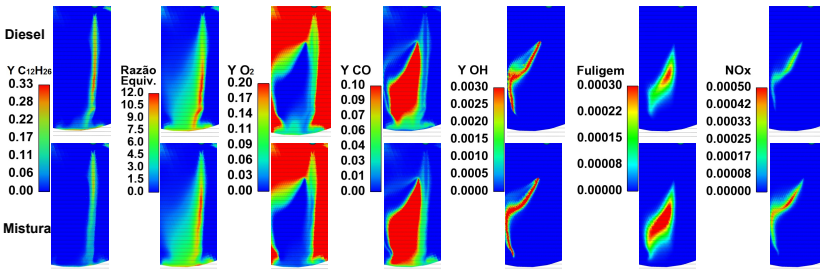


Figura 63 – Contornos de $Y_{C_{12}H_{26}}$, razão de equivalência, Y_{O_2} , Y_{CO} , Y_{OH} , fuligem e NO_x para o jato 1 do diesel e mistura 80s20d para 1800 rpm e $-3,0^\circ$. (Fonte: Autor)

Nas imagens de contornos da Fig. 63 para a chama, a estrutura da chama pode se ver em função de contornos de vapor de combustível, razão de equivalência, O₂, CO, OH, fuligem e NOx para o jato 1 do diesel e 80s20d em 1800 rpm e $3,0^\circ$ antes do PMS.

Os contornos de temperatura para o jato 1 em dois ângulos de manivela podem-se ver na Fig. 57a. Os contornos mostram uma chama parcialmente pré-misturada com uma zona rica perto da saída do injetor e uma zona não pré-misturada na periferia da chama, o qual mostra que a simulação pode prever o modelo conceitual, o qual caracteriza a combustão diesel. Nas imagens, o escoamento atinge o lado direito do jato 1 com uma razão de *swirl* de 2,1, por tal motivo o spray é deslocado para a esquerda onde é formada mais rápido a mistura combustível-ar e por tanto neste lado é iniciada a ignição. No lado esquerdo do spray é formada a chama em uma zona rica de combustível e são produzidas espécies intermédias, e estas novas espécies são consumidas na zona de difusão. O contorno da espécie OH localiza a região de chama de difusão de acordo com (Dec, 1997). O contorno de CO é um indício de que a fuligem pode ser produzida a jusante da zona pré-misturada e que o NOx será produzido na zona não pré-misturada a qual tem maior temperatura.

De acordo com a direção em que sai o líquido em cada um dos jatos, o combustível atinge diferentes partes no interior do cilindro e por tanto a combustão ocorre na totalidade do cilindro pela boa distribuição do spray. Como a injeção ocorre em -15° , o spray e a combustão ocorrem também na região de *squish* antes de que o pistão chegue ao PMS. Na expansão, a combustão continua distribuindo-se por todo o cilindro como na Fig. 64, e o progresso da combustão ocorre na direção do escoamento como é marcado na figura pelos vetores de velocidade.

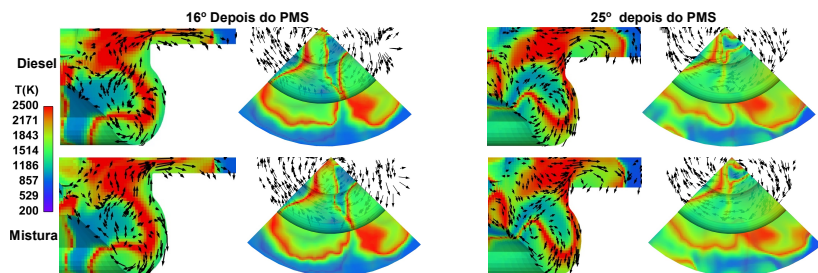


Figura 64 – Distribuição de temperatura no cilindro em dois ângulos para diesel e mistura 80s20d em 1800 rpm. (Fonte: Autor)

A distribuição radial e axial da fração de mistura (Z) em cada spray de combustível são influenciadas pelo *swirl* no interior do cilindro como mostrado na Fig. 57b, para o spray do furo 1. Para

o combustível n-dodecano, a fração de mistura estequiométrica (Z_{st}) calculada com a Equação (5.42), corresponde a um valor de 0,062.

Os estudos experimentais feitos por pesquisadores mostram que o movimento do *swirl* no cilindro pode afetar o comprimento de descolamento da chama (*LOL*) assim como a estabilização da chama. O *LOL* é definido como a distância quasi-uniforme da chama a partir do injetor, e o assentamento da chama é devido a um equilíbrio entre os processos químicos e de formação de mistura, o qual tem grande impacto na formação de poluentes por sua relação com a temperatura da chama. A temperatura, a massa específica do ambiente, a pressão de injeção influenciam no *LOL* já que esta distância é dependente da velocidade do combustível na saída do injetor. De acordo com (Peters, 2000), o *LOL* é a distância onde há equivalência entre a velocidade do jato de combustível e a velocidade do frente de chama, e então um aumento na pressão de injeção aumenta a velocidade de combustível e move para frente esta distância de equilíbrio.

O *LOL* da chama é definido por (Som *et al.*, 2011), na simulação feita em *Converge CFD*, como a localização a montante mais perto do contorno de temperatura ≥ 2200 K, mas a simulação feita na sua pesquisa é em ambiente quiescente, e pela influência do escoamento, principalmente pelo *swirl* na simulação feita neste trabalho para o motor Yanmar, o *LOL* é difícil de identificar.

5.4.6 Formação de NOx e fuligem

Na fase de combustão pré-misturada, como mostrado na Fig. 58, em uma faixa curta de tempo é liberada grande quantidade de energia o qual aumenta a temperatura no cilindro e por tanto o resultado é que a taxa de formação de NOx aumenta, gerando nesta curta faixa a maior quantidade de NOx, Fig. 65b. Mais na frente, na combustão não pré-misturada a taxa de formação de fuligem é aumentada devido à combustão rica no jato de spray onde a razão de equivalência (Φ) tem valores entre 1,5 e 4 como pode se ver na Fig 63, e com temperatura superior a 2000 K, Fig. 57a.

As emissões de NOx são menores para o diesel quando comparadas à mistura 80s20d, o qual pode ser atribuído a que a maior quantidade de oxigênio promove a produção de estas emissões.

Na Fig. 65a, o aumento nos valores de fuligem caracteriza o processo de formação o qual aumenta de forma gradual e atinge um máximo, a partir do qual começa a diminuir e isto caracteriza a

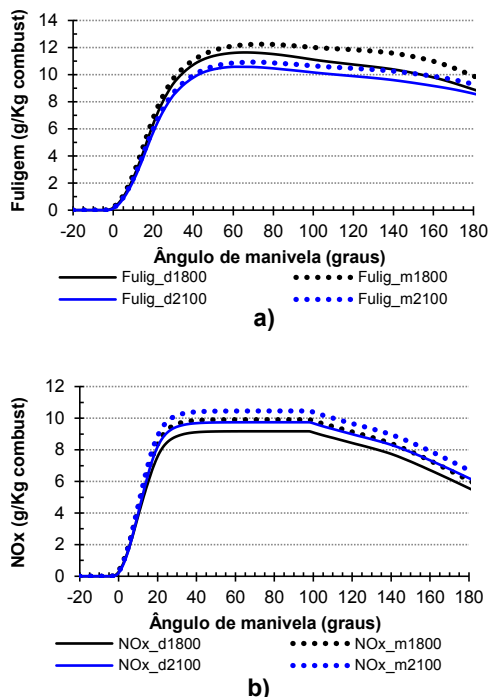


Figura 65 – a) Geração de fuligem. b) Geração de NOx em função do ângulo de manivela. (Fonte: Autor)

oxidação de fuligem. A formação de fuligem domina o processo até aproximadamente 55° , o qual pode ser atribuído a que de ali para frente se tem uma chama menos rica em seu centro e então na zona de reação a formação de fuligem é menor. As emissões de fuligem são maiores para a mistura 80s20d que para o diesel.

5.4.7 Parâmetros de desempenho e de eficiência

O trabalho indicado por ciclo do motor para efeitos de validação/comparação é obtido por dois metodologias: da integração dos dados de pressão Vs volume para todo o ciclo e do balanço de energia no volume de controle (cilindro). Os seguintes parâmetros são calculados usando o trabalho indicado e as características de operação do motor, Tabela 16.

Ao comparar o valor dos parâmetros indicados, calculados

Tabela 16 – Parâmetros indicados de desempenho e eficiência do motor. (Fonte: Autor)

| Parâmetro | Obtido p-V | | | | Balanço de energia | | | |
|----------------------------------|------------|-------|-------|-------|--------------------|-------|-------|-------|
| | d1800 | m1800 | d2100 | m2100 | d1800 | m1800 | d2100 | m2100 |
| Trabalho por ciclo [kJ] | 0,841 | 0,850 | 0,823 | 0,825 | 0,911 | 0,912 | 0,913 | 0,894 |
| Pressão média efetiva [kPa] | 704,1 | 712,3 | 689,1 | 690,4 | 762,8 | 763,7 | 764,7 | 748,2 |
| Potência [kW] | 12,6 | 12,8 | 14,4 | 14,5 | 13,6 | 13,7 | 16,0 | 15,6 |
| Consumo espec. de comb. [g/kW-h] | 291,4 | 300,1 | 290,4 | 294,3 | 269,0 | 279,9 | 261,7 | 271,6 |
| Eficiência térmica [%] | 29,1 | 31,6 | 29,2 | 32,2 | 31,5 | 33,8 | 34,2 | 34,9 |

pelas duas metodologias, é possível ver que estes valores estão muito perto um de outro. Em termos de potência, a diferença é de 8,0%, para o consumo específico de combustível a diferença é de 8,7% e para a eficiência térmica é de 9,1%.

É importante considerar que para os cálculos de consumo específico e eficiência térmica foi usada a massa total de combustível injetado por ciclo (seção 4.3.1), mas não todo o combustível é queimado, já que no cilindro fica uma massa residual em forma líquida e em vapor. Para obter a massa de combustível residual, é considerada a massa que está no interior do cilindro no momento de abrir a válvula de exaustão (84° de ângulo de manivela).

Para o motor em 1800 rpm a massa de combustível residual no momento de abrir a válvula de exaustão é de 1,0% da massa injetada, e para o motor em 2100 rpm a massa residual é de 0,9% da massa injetada.

Tabela 17 – Parâmetros desempenho de freio e de eficiência do motor. (Fonte: Autor)

| Parâmetro | d1800 | m1800 | d2100 | m2100 |
|----------------------------------|-------|-------|-------|-------|
| Trabalho por ciclo [kJ] | 0,832 | 0,772 | 0,774 | 0,737 |
| Pressão média efetiva [kPa] | 696,8 | 646,7 | 648,0 | 617,0 |
| Potência [kW] | 12,5 | 11,6 | 13,6 | 12,9 |
| Consumo espec. de comb. [g/kW-h] | 294,6 | 330,8 | 308,9 | 329,5 |
| Eficiência térmica [%] | 28,8 | 28,7 | 27,5 | 28,8 |

Os parâmetros de desempenho ao freio no motor (Garzón, 2017), estão relacionados na Tabela 17, e pode se ver que estes parâmetros têm valores inferiores quando comparados como os parâmetros indicados da Tabela 16. No entanto, os valores estão próximos e pode se concluir que a simulação em *Converge CFD*, é adequada para representar a fenomenologia da combustão de spray no motor.

5.5 CONCLUSÕES

A diferença nas propriedades do combustível diesel e da mistura 80s20d tem efeitos na formação de mistura combustível-ar no cilindro, o qual influencia na combustão e nas emissões para cada um dos combustíveis.

Para a mistura 80s20d o início da combustão é mais tardio do que o diesel, pela maior tensão superficial e viscosidade, mas com o aquecimento da mistura 80s20d, este atraso de ignição pode se diminuir. A mistura 80s20d também apresenta maior tamanho de gota, maior penetração do spray e baixa taxa de evaporação quando comparado com o diesel, quando estão na mesma temperatura de injeção, e por tal motivo ao ser aquecida a mistura 80s20d à 85 K acima da temperatura do diesel, estas propriedades no cilindro são muito similares ao diesel.

A penetração do spray no motor é influenciada pelo pistão em seu avanço para o PMS, pelos efeitos dinâmicos do escoamento e pelo início da combustão, por tanto as imagens do spray mostram diferenças com imagens que são obtidas por outros autores em ambiente quiescente.

Na simulação são obtidos dados do início da combustão, os quais estão de acordo com os dados obtidos da curva de pressão experimental, em termos de tempo. Os pontos onde se obtém o início da combustão concordam com o concluído por outros pesquisadores.

É mostrado que a mistura de combustível-ar está submetida no motor a dois estados de combustão, onde o primeiro inicia em mistura pobre seguindo para uma temperatura localmente alta, e o segundo estado inicia em mistura rica devido a que a mistura rica pode oferecer mais radicais do que o primeiro estado.

O combustível diesel e a mistura 80s20d têm comprimento de penetração de spray muito similar, mas apresentam diferenças quando comparados no tempo, o qual é considerado que se deve às diferenças na massa específica e na viscosidade.

O maior conteúdo de oxigênio no combustível contribui a melhor oxidação, mas promove as emissões de NOx.

Capítulo 6

CONCLUSÕES

Nesse trabalho, realizou-se uma análise comparativa da combustão em um motor de ignição por compressão operando com uma mistura de óleo vegetal *in-natura* e óleo diesel com a operação com óleo diesel apenas. As propriedades dos combustíveis foram medidas ou obtidas da literatura e correlacionadas com a temperatura. O motor utilizado também foi ensaiado em dinamômetro de forma a fornecer resultados que foram comparados com o modelo. Da análise dos resultados das simulações, várias conclusões foram obtidas. As principais conclusões são listadas a seguir.

Na análise do escoamento no interior do cilindro considerando os cursos de admissão e compressão, se obtém parâmetros de escoamento consistentes quando comparados com dados experimentais (p.e. pressão) e numéricos de outros estudos feitos, o qual fornece um conhecimento do comportamento do escoamento no motor e é visto que a configuração do pistão do motor (câmara de combustão na coroa do pistão), aumenta o *swirl* no final da compressão com razão de *swirl* de 2,05.

Os valores das propriedades ρ , σ e μ têm influência nas forças intermoleculares no líquido e na formação de gotas e como consequência os combustíveis com valores baixos destas propriedades sofrem atomização mais rápido que os de alto valor nestas propriedades (na temperatura de injeção, o diesel atinge regime de atomização com números de Re da ordem de 5000 e número de Ohnesorge da ordem de 0,06, entanto que a mistura esta no limite do regime de atomização com números de Re da ordem de 300 e número de Ohnesorge da ordem de 0,65).

O alto ponto de ebulição da mistura 80s20d gera que o combustível permaneça por mais tempo na fase líquida (0,04 ms a mais), quando comparada ao diesel devido a que a mistura 80s20d é menos volátil, mas com o aquecimento da mistura 80s20d, esta apresenta um comportamento muito próximo ao combustível diesel em características de spray e de combustão.

O aumento da temperatura do spray de combustível no interior do cilindro produz que o tamanho local das gotas seja maior

devido a que as gotas pequenas são evaporadas, e as gotas maiores permanecem no domínio computacional.

Os maiores valores das propriedades termofísicas da mistura 80s20d ao comparado com às do diesel resulta em que para a mistura 80s20d é requerida maior pressão na injeção, e a alta pressão de injeção resulta em maior penetração de spray (1,05 vezes maior). A diferença nas propriedades entre o diesel e a mistura 80s20d tem efeitos na formação de mistura combustível-ar no cilindro e por tanto para a mistura 80s20d o início da combustão é mais tardio do que o diesel, pela maior tensão superficial e viscosidade, mas com o aquecimento da mistura 80s20d este atraso de ignição pode-se diminuir, sendo neste caso o tempo de atraso da ignição de aproximadamente 0,5^o menor para a mistura.

Os resultados obtidos na análise de spray e combustão de óleo vegetal de soja *in natura* em motor de ignição por compressão são uma potencial ferramenta para o desenvolvimento de combustíveis alternativos e desenvolvimento de tecnologia em motores de ignição por compressão.

Como considerações finais se propõem os seguintes temas de trabalho para o futuro:

1. Analisar a influência das condições de contorno e de parede nos resultados de spray e de combustão para o modelo simulado.
2. Fazer uma modelagem da evaporação de óleo vegetal *in natura*, considerando a degradação térmica.
3. Desenvolver um mecanismo cinético para a combustão de óleos vegetais *in natura*.

REFERÊNCIAS

- AGARWAL, A. K.; CHAUDHURY, V.; AGARWAL, A.; SHUKLA, P. C. Comparative study of macroscopic spray parameters and fuel atomization behaviour of straight vegetable oils (jatropha), its bio-diesel and blends. **Thermal Science**, v. 17, n. 1, p. 217–232, 2013.
- BAUMGARTEN, C. **Mixture Formation in Internal Combustion Engines**. Germany: Springer, 2006.
- BEJAN, A. **Convection Heat Transfer**. 4. ed. United States of America: John Wiley & Sons, Inc., 2013.
- BERTOLDI, D. **Simulação Numérica de um Modelo Simplificado de um Motor a Combustão Interna a Gás Natural**. Master's Thesis (Master's Thesis) — Universidade Federal de Santa Catarina, Brazil, 2007.
- BYATT-SMITH, J.; DAY, R.; HARLEN, O.; LISTER, J.; SMITH, S. L.; PLEASE, C. **Temperature of diesel fuel spray at injector nozzle hole exit**. United States of America, 1996.
- CEBECI, T. **Analysis of Turbulent Flows**. 2. ed. Netherlands: Elsevier, 2004.
- CHEN, P.-C.; WANG, W.-C.; ROBERTS, W. L.; FANG, T. Spray and atomization of diesel fuel and its alternatives from a single-hole injector using a common rail fuel injection system. **Fuel**, v. 103, p. 850–861, 2013.
- CLARK, P. E.; WALDELAND, C.; CROSS, R. P. Specific heat of vegetable oils from 0 to 280 °C. **Industrial and Engineering Chemistry**, v. 38, n. 3, p. 350–353, 1946.
- CORPORATION, C. **Diesel Fuels Technical Review**. United States of America, 2007.
- CROWE, C. T.; SCHWARZKOPF, J. D.; SOMMERFELD, M.; TSUJI, Y. **Multiphase Flows with Droplets and Particles**. 2. ed. United States of America: Taylor & Francis Group, 2012.

DEC, J. E. A conceptual model of di diesel combustion based on laser-sheet imaging. **SAE Technical Papers**, v. 970873, p. 1–30, 1997.

DEMIRBAS, A. **Biodiesel**. Germany: Springer, 2008.

DESCHAMPS, C. Modelagem de escoamentos turbulentos. 2014.

DESHMUKH, D.; MOHAN, A. M.; ANAND, T.; RAVIKRISHNA, R. Spray characterization of straight vegetable oils at high injection pressures. **Fuel**, v. 97, p. 879–883, 2012.

ELKOTB, M. Fuel atomization for spray modelling. **Progress in Energy Combustion Science**, v. 8, n. 1, p. 61–91, 1982.

ESTEBAN, B.; RIBA, J.-R.; BAQUERO, G.; PUIG, R.; RIUS, A. Characterization of the surface tension of vegetable oils to be used as fuel in diesel engines. **Fuel**, v. 102, p. 231–238, 2012.

ESTEBAN, B.; RIBA, J.-R.; BAQUERO, G.; RIUS, A.; PUIG, R. Temperature dependence of density and viscosity of vegetable oils. **Biomass and Bioenergy**, v. 42, p. 164–171, 2012.

FERNÁNDEZ, J.; MARCOS, A. Simulación del flujo de aire en un motor diesel. **XIV International Congress on Project Engineering**, p. 2262–2272, 2010.

GAO, Y.; DENG, J.; LI, C.; DANG, F.; LIAO, Z.; WU, Z.; LI, L. Experimental study of the spray characteristics of biodiesel based on inedible oil. **Biotechnology Advances**, v. 27, n. 5, p. 616–624, 2009.

GARZÓN, N. A. N. **Análise experimental e exergética da operação de um motor diesel com óleo vegetal**. Master's Thesis (Master's Thesis) — Universidade Federal de Santa Catarina, Brazil, 2012.

GARZÓN, N. A. N. **Measurement and modeling of the combustion of straight soybean oil and diesel oil blends in a compression ignition engine**. Phd Thesis (phdthesis) — Federal University of Santa Catarina, Brasil, 2017.

GONG, C.; JANGI, M.; BAI, X.-S. Large eddy simulation of n-dodecane spray combustion in a high pressure combustion vessel. **Applied Energy**, v. 136, p. 373–381, 2014.

HAMMOND, E. G.; JOHNSON, L. A.; SU, C.; WANG, T.; WHITE, P. J. **Bailey's Industrial Oil and Fat Products**. Sixth. United States of America: Fereidoon Shahidi, 2005.

HEYWOOD, J. B. **Internal Combustion Engines Fundamentals**. United States of America: McGraw-Hill, 1988.

HOFFMANN, J.-F.; HENRY, J.-F.; VAITILINGOM, G.; OLIVES, R.; CHIRTOC, M.; CARON, D.; PY, X. Temperature dependence of thermal conductivity of vegetable oils for use in concentrated solar power plants, measured by 3omega hot wire method. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 107, p. 105–110, 2016.

ISMAIL, H. M.; NG, H. K.; GAN, S.; CHENG, X.; LUCCHINI, T. Investigation of biodiesel-diesel fuel blends on combustion characteristics in a light-duty diesel engine using opemfoam. **Energy and Fuels**, v. 27, n. 1, p. 208–219, 2012.

JAYASHANKARA, B.; GANESAN, V. Effect of fuel injection timing and intake pressure on the performance of a DI diesel engine—a parametric study using cfd. **Energy Conversion and Management**, v. 51, n. 10, p. 1835–1848, 2010.

KARTHIKEYAN, S.; HARIGANESH, R.; SATHYANADAN, M.; KRISHNAN, S. Computational analysis of intake manifold design and experimental investigation on diesel engine for lcv. **International Journal of Engineering Science and Technology**, v. 3, n. 4, p. 2359–2367, 2011.

KASPRZYCKA-GUTTMAN, D. O. T. Specific heat of some oils and a fat. **Thermochimica Acta**, v. 191, p. 41–45, 1991.

KIM, K.; KIM, D.; JUNG, Y.; BAE, C. Spray and combustion characteristics of gasoline and diesel in a direct injection compression ignition engine. **Fuel**, v. 109, p. 616–626, 2013.

KOLAKALURI, R. **Engine spray combustion modeling using unified spray model with dynamic mesh refinement**. Master's Thesis (Master's Thesis) — Iowa State University, 2009.

KOMERS, K.; STLOUKAL, R.; MACHEK, J.; SKOPAL, F. Biodiesel from rapeseed oil, methanol and koh 3. analysis of composition of actual reaction mixture. **European Journal of Lipid Science and Technology**, v. 103, n. 6, p. 363–371, 2001.

KUO, K.; ACHARYA, R. **Fundamentals of Turbulent and Multiphase Combustion**. United States of America: John Wiley & Sons, Inc, 2012.

KUTI, O. A.; ZHU, J.; NISHIDA, K.; WANG, X.; HUANG, Z. Characterization of spray and combustion processes of biodiesel fuel injected by diesel engine common rail system. **Fuel**, v. 104, p. 838–846, 2013.

LAKSHMINARAYANAN, P.; AGHAV, Y. V. **Modelling Diesel Combustion**. United States of America: Springer, 2010.

LEFEBVRE, A. H. **Atomization and Sprays**. 1. ed. United States of America: Taylor and Francis Group, 1989.

LESNIK, L.; VAJDA, B.; ZUNIC, Z.; SKERGET, L.; KEGL, B. The influence of biodiesel fuel on injection characteristics, diesel engine performance, and emission formation. **Applied Energy**, v. 111, p. 558–570, 2013. ISSN 0306-2619.

LUO, Z.; SOM, S.; SARATHY, S. M.; PLOMER, M.; PITZ, W. J.; LONGMAN, D. E.; LU, T. Development and validation of an n-dodecane skeletal mechanism for spray combustion applications. **Combustion Theory and Modelling**, v. 18, n. 2, p. 187–203, 2014.

MERKER, G. P.; SCHWARZ, C.; TEICHMANN, R. **Combustion Engines Development**. Germany: Springer, 2009.

PARK, S. H.; KIM, H.; SUH, H.; SIK-LEE, C. Experimental and numerical analysis of spray-atomization characteristics of biodiesel fuel in various fuel and ambient temperatures condition. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, v. 30, n. 5, p. 960–970, 2009.

PAYRI, F.; BENAJES, J.; MARGOT, X.; GIL, A. Cfd modeling of the in-cylinder flow in direct-injection diesel engines. **Computers & Fluids**, v. 33, n. 8, p. 995–1021, 2004.

PAYRI, R.; GARCIA-OLIVER, J. M.; BARDI, M.; MANIN, J. Fuel temperature influence on diesel sprays in inert and reacting conditions. **Applied Thermal Engineering**, v. 35, n. 1, p. 185–195, 2012.

- PEI, Y.; MEHL, M.; LIU, W.; LU, T.; PITZ, W. J.; 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, n. 11, p. 1–9, 2015.
- PERRY, E. S.; WEBER, W. H.; DAUBERT, B. F. Vapor pressures of phlegmatic liquids. simple and mixed triglycerides. **Journal of the american chemical society**, v. 71, n. 11, p. 3720–3726, 1949.
- PESIC, R. B.; DAVINIC, A. L.; PETROVIC, S. D.; TARANOVIC, D. S.; MILORADOVIC, D. M. Aspects of volumetric efficiency measurement for reciprocating engines. **Thermal Science**, v. 17, n. 1, p. 35–48, 2013.
- PETERS, N. **Turbulent Combustion**. 1. ed. United Kingdom: Cambridge University Press, 2000.
- PULKRABEK, W. W. **Engineering Fundamentals of the Internal Combustion Engine**. United States of America: Prentice Hall, 1997.
- RAMIREZ, A.; SOM, S.; RUTTER, T.; LONGMAN, D.; AGGARWAL, S. Investigation of effects of rate of injection on combustion phasing and emission characteristics: experimental and numerical study. In: **Spring Technical Meeting of the Central States Section of the Combustion Institute**. [S.l.: s.n.], 2012.
- RAMIREZ, H. P.; FIKRI, M.; CANCINO, L. R.; MORÉAC, G.; SCHULZ, C.; DAGAUT, P. Autoignition of surrogate biodiesel fuel (b30) at high pressures: Experimental and modeling kinetic study. **Combustion and Flame**, v. 159, p. 996–1008, 2012.
- RECH, C. **Análise numérica e experimental do escoamento em motores de combustão interna**. Phd Thesis (PhD Thesis) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brazil, 2010.
- REDDY, P. R.; KRISHNA, D. M.; MALLAN, K. G.; GANESAN, V. Evaluation of combustion parameters in direct injection diesel engines - an easy and reliable method. **SAE Technical Papers**, v. 930605, p. 159–165, 1993.
- REITER, A. M.; WALLEK, T.; PFENNIG, A.; ZEYMER, M. Surrogate generation and evaluation for diesel fuel. **Energy & fuels**, v. 29, n. 7, p. 4181–4192, 2015.

RICHARDS, K.; SENEAL, P.; POMRANING, E. **Converge v2.3 Manual**. United States of America: Convergent Science, Inc., 2016.

ROJAS, E. E. G.; COIMBRA, J. S. R.; TELIS-ROMERO, J. Thermophysical properties of cotton, canola, sunflower, and soybean oils as a function of temperature. **International Journal of Food Properties**, v. 16, n. 7, p. 1620–1629, 2013.

SANTOS, R. G. dos; CAVAGLIERI, M. R.; MOURA, T. M. An experimental approach for intake manifold tuning for internal combustion engines. **22nd International Congress of Mechanical Engineering**, p. 7521–7531, November 2013.

SAZHIN, S.; ABDELGHAFAR, W.; SAZHINA, E.; HEIKAL, M. Models for droplet transient heating: effects on droplet evaporation, ignition and break-up. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 44, n. 7, p. 610–622, 2005.

SENECAL, P.; E.POMRANING; XUE, Q.; SOM, S.; BANERJEE, S.; HU, B.; LIU, K.; DEUR, J. Large eddy simulation of vaporizing sprays considering multi-injection averaging and grid-convergent mesh resolution. **Journal of Engineering for Gas Turbines and Power**, v. 136, n. 11, 2013.

SENECAL, P.; POMRANING, E.; RICHARDS, K.; BRIGGS, T.; CHOI, C.; MCDAVID, R.; PATTERSON, M. Multi-dimensional modeling of direct-injection diesel spray liquid length and flame lift-off length using cfd and parallel detailed chemistry. **SAE Technical papers**, 2003.

SENECAL, P.; POMRANING, E.; RICHARDS, K. J.; SOM, S. Grid-convergent spray models for internal combustion engine cfd simulations. In: **ASME Internal Combustion Engine Division**. [S.l.: s.n.], 2012.

SHI, Y.; GE, H.-W.; REITZ, R. D. **Computational optimization of internal combustion engines**. United States of America: Springer, 2011.

SOM, S.; AGGARWAL, S. Effects of primary breakup modeling on spray and combustion characteristics of compression ignition engines. **Combustion and Flame**, v. 157, n. 6, p. 1179–1193, 2010.

SOM, S.; LONGMAN, D. E.; LUO, Z.; LU, T. Three dimensional simulations of diesel sprays using n-dodecane as a surrogate. In: . United States of America: ResearchGate, 2011.

SREENIVASULU, M.; NADHAMUNI, C.; HEMACHANDRA, K. Influence of swirl on spray characteristics and combustion, a numerical investigation of a caterpillar diesel engine. **International Journal of Engineering Science and Technology**, v. 4, n. 10, p. 4352–4358, october 2012.

STIESCH, G. **Modeling Engine Spray and Combustion Processes**. Germany: Springer, 2003.

SUSHMA, H.; JAGADEESHA, K. Cfd modeling of the in-cylinder flow in direct-injection diesel engine. **International Journal of Scientific and Research Publications**, v. 3, n. 12, 2013.

TONI, A. R. D.; WERLER, M.; HARTMANN, R. M.; ROCHA, M. I.; CANCINO, L. R.; SCHIEBL, R.; FIKRI, M.; SCHULZ, C.; OLIVEIRA, A. A. M.; OLIVEIRA, E.; ROCHA, M. I. Ignition delay times of jet a-1 fuel: Measurements in a high-pressure shock tube and a rapid compression machine. **Proceedings of the combustion institute**, v. 36, n. 3, 2016.

URNS, S. R. **An Introduction to Combustion**. 2. ed. United States of America: McGraw-Hill, 2000.

VERSTEEG, H.; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics**. United States of America: John Wiley and Sons Inc, 1995.

WAGNER, G. L.; PETERSON, C. L. Performance of winter rape (brassica napus) based fuel mixture in diesel engines. **International conference on plant and vegetable oils as fuels**, p. 329–336, 1982.

WILCOX, D. C. **Turbulence Modeling for CFD**. United States of America: DCW Industries, Inc, 1993.

WU, J.; LIU, Z.; JIN, X.; PAN, J. Thermal conductivity of some oxygenated fuels and additives in the saturated liquid phase. **Journal of Chemical and Engineering Data**, v. 50, n. 1, p. 102–104, 2005.

ZANCANARO, F. V. **Simulação Numérica do escoamento Turbulento em Motores de Combustão Interna**. Master's Thesis (Master's Thesis) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brazil, 2010.

ZHOU, L.; LUO, K. H.; QIN, W.; JIA, M.; SHUAI, S. J. Large eddy simulation of spray and combustion characteristics with realistic chemistry and high-order numerical scheme under diesel engine-like conditions. **Energy Conversion and Management**, v. 93, p. 377–387, 2015.

APÊNDICE A

ANÁLISE DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR NO MOTOR

As condições de contorno na geometria do motor para a simulação do spray e combustão de spray requer que seja especificada uma temperatura na superfície sólida que está na interface sólido/fluido. As fronteiras que não têm informação sobre a temperatura correspondem à parede do cilindro, parede do pistão, parede do cabeçote e às válvulas de admissão e exaustão. Estas temperaturas são difíceis de medir de forma experimental e na literatura é difícil obter dados específicos para o tipo de motor simulado já que são mostrados resultados de análises teóricas e experimentais, mas não fornecem resultados concretos que possam ser usados na presente simulação.

Para obter valores de temperatura nas fronteiras sólidas do motor, e serem usados nas simulações de spray e combustão, foi feita uma simulação para o motor, considerando combustão e paredes sólidas em *Converge CFD* e transferência de calor no fluido e em sólidos. Como as escalas de tempo de transferência de calor no sólido são maiores que as escalas de tempo no fluido, *Converge CFD* usa a abordagem *super cycling* para a solução de problemas de transferência de calor conjugados. A abordagem em termos geral é assim:

1. São resolvidas as equações de fluido e de sólido, mas não são armazenados os dados de transferência de calor no sólido desde o início da simulação até um tempo denominado tempo de início de super ciclo. Quando é atingido o tempo de início de super ciclo *Converge CFD* começa a armazenar valores para coeficiente de transferência de calor (HTC) e de temperatura para cada célula próxima na parede na interface sólido/fluido para cada intervalo de tempo.
2. É continuado a resolver tanto as equações de fluido como de sólido e são armazenados os dados de HTC e de temperatura

- nas células perto da parede por um tempo designado como intervalo de estado de super ciclo.
3. Em um tempo igual à soma de tempo de início de super ciclo mais intervalo de estado de super ciclo, é feita uma pausa no solver de fluido e é calculada a média de HTC e de temperatura para cada célula na interface solido/fluido com base nos valores armazenados anteriormente. É feito o calculo de transferência de calor no sólido em este momento usando os valores médios de HTC e temperatura. Este calculo de transferência de calor em sólido é feito em estado estável.
 4. Depois de realizar os cálculos de transferência de energia em sólido, a temperatura do sólido representa a temperatura em estado estacionário, e esta temperatura é o pico de temperatura no início de um novo super ciclo, ou super ciclo dois (2).
 5. *Converge CFD* inicia de novo o solver de fluido após o calculo de temperatura no sólido e resolve novamente as equações de fluido e sólido por um tempo igual à tempo de intervalo de estado de super ciclo, e continua o processo de acordo com os super ciclos estabelecidos na simulação.

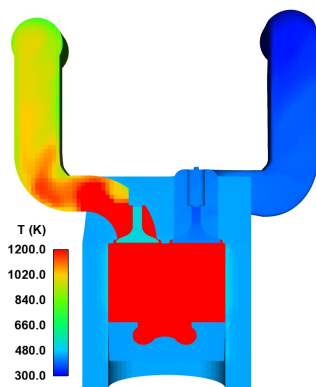


Figura A. 1 – Seção da geometria do motor na simulação de transferência de calor. (Fonte: Autor)

Para a simulação de transferência de calor, foi iniciado o armazenamento de dados em 60° , e é definido um tempo de intervalo de estado de super ciclo de 60° .

A geometria usada na simulação é a mostrada em uma seção na Fig. A. 1, e a simulação feita tem as seguintes considerações gerais:

1. Simulação total de 25 ciclos do motor de ignição por compressão. A simulação total é dividida em 5 simulações de 5 ciclos cada uma, considerando que as condições finais obtidas em cada simulação previa correspondem às condições iniciais da seguinte simulação.
2. Início de cada simulação em -360° e simula cinco (5) ciclos do motor, terminando em 3240° .
3. Em cada simulação a combustão é considerada usando a taxa de liberação de calor no cilindro, obtida de uma simulação preliminar de combustão de n-dodecano, onde é usado um mecanismo cinético.
4. Para a primeira simulação as condições iniciais de temperatura na região sólida são baseadas nos dados da literatura, para motores de ignição por compressão.
5. Na primeira simulação as condições iniciais de temperatura, pressão, energia cinética turbulenta, taxa de dissipação e espécies para o fluido na região, são tomadas dos resultados obtidos de uma simulação inicial combustão de n-dodecano em um tempo que corresponde a -360° .
6. Como condições de contorno nas paredes externas do sólido para a temperatura é usado o fluxo de calor (q''), o qual é obtido para a primeira simulação, da forma descrita a continuação.
7. Os materiais usados para os sólidos no motor são o alumínio e aço.

A obtenção de dados iniciais de (q'') é feita da seguinte forma: a) com uma simulação previa de combustão de n-dodecano usando um mecanismo cinético são obtidos dados da vazão de calor (\dot{Q}) em cada uma das paredes que formam a geometria, e também dados da área superficial interna da transferência de calor (A_{int}), b) usando estes dados é calculado q''_{int} em cada uma das fronteiras para a faixa de simulação de combustão, c) usando os dados de \dot{Q} e a área externa das paredes (A_{ext}) de cada sólido que conformam a geometria com a

qual é simulada transferência de calor (Fig. A. 1), é calculado o fluxo de calor externo em cada fronteira q''_{ext} , e seu valor médio é usado como condição de contorno na primeira simulação de transferência de calor no motor (primeiros 5 ciclos simulados). A transferência de calor na parte interna na simulação de combustão com parede sem espessura, corresponde a fluxo de calor na célula adjacente á fronteira, ou seja ao fluido.

Análise de dados de transferência de calor

A simulação de transferência de calor é feita para cinco (5) ciclos completos do motor de forma sequencial, e ao obter os resultados da primeira simulação, estes são analisados para usar os dados obtidos como condições de contorno e condições iniciais em uma nova simulação de transferência de calor de cinco (5) ciclos, e assim é feito com cinco simulações para um total de vinte cinco (25) ciclos do motor de combustão interna.

Os resultados obtidos da simulação de transferência de calor inicial são analisados em função do ângulo de manivela para ver sua variação de ciclo a ciclo. São obtidos os valores médios de q''_{ext} na simulação inicial e estes dados são usados como condições de contorno para as paredes externas do sólido em uma nova simulação de transferência de calor.

A temperatura média em cada região de fluido e de sólido em função do ângulo de manivela são analisados para ver sua variação de ciclo a ciclo. De esta forma é visto como muda a temperatura dos sólidos e é obtida a temperatura media final para cada região sólida a qual é usada como condição inicial em uma nova simulação de transferência de calor.

O *Converge CFD* também da como resultado a temperatura em função do ângulo de manivela na fronteira sólida na interface sólido/fluido o fronteira interna a qual é analisada para ver como evolui de ciclo a ciclo.

Com a análise feita, são obtidos os seguintes dados os quais são usados em uma seguinte simulação de transferência de calor: condições iniciais de temperatura no fluido, condições iniciais de temperatura nos sólidos e condições de contorno para as paredes externas com novos valores de q''_{ext} .

O processo de análise de dados de simulação de transferência de calor é feito para as cinco simulações de forma que na simulação final não é detetada variação nos dados analisados de ciclo a ciclo,

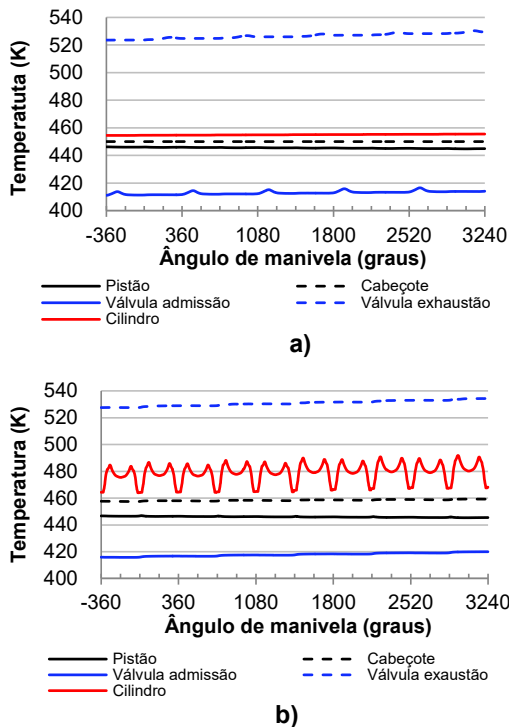


Figura A. 2 – (a) Temperatura média na região sólida. (b) Temperatura no sólido na interface sólido/fluido. (Fonte: Autor)

e então no ciclo número 25 são obtidos resultados onde para o q''_{ext} não é detetada variação de um ciclo a outro.

Ao analisar a temperatura média nas regiões sólidas e de fluido, também se vê que a temperatura não apresenta variação de ciclo a ciclo, e por tanto se considera que esta é a temperatura da região principalmente para os sólidos, como mostrado na Fig. A. 2a, onde são mostrados os dados de temperatura em função do ângulo de manivela para os últimos cinco ciclos simulados.

A temperatura para os sólidos na interface sólido/fluido em função do ângulo de manivela para os últimos cinco ciclos simulados é mostrada na Fig. A. 2b, e pode se ver que não têm variações de ciclo a ciclo.

A temperatura média no sólido, obtida no ultimo ciclo é a

temperatura que é utilizada como condição de contorno nas fronteiras na simulação de escoamento, de spray de combustível e em combustão de spray.