

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

*SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UM MODELO SIMPLIFICADO DE
UM MOTOR À COMBUSTÃO INTERNA A GÁS NATURAL*

Dissertação submetida à

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

para a obtenção do grau de

MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA

DALTON BERTOLDI

Florianópolis, Novembro de 2007.

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

***SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UM MODELO SIMPLIFICADO DE
UM MOTOR À COMBUSTÃO INTERNA A GÁS NATURAL***

DALTON BERTOLDI

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de

MESTRE EM ENGENHARIA

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA
Área de Concentração de Engenharia e Ciências Térmicas

sendo aprovada em sua forma final.

Prof. César José Deschamps, Ph.D. – Orientador

Prof. Amir Antônio Martins Oliveira Jr., Ph.D. – Co-orientador

Prof. Fernando Cabral, Ph.D. – Coordenador do Curso

BANCA EXAMINADORA

Prof. Antônio Fábio Carvalho da Silva, Dr. Eng. – Presidente

Prof. Guenther Carlos Krieger Filho, Dr.-Ing.

Prof. José Ricardo Sodré, Ph.D.

Aos meus pais, Mário e Solange,
às minhas irmãs, Bruna e Letícia,
e à minha namorada, Franciele.

AGRADECIMENTOS

A CAPES, pelo apoio financeiro ao trabalho;

Ao POLO – Laboratórios de Pesquisa em Refrigeração e Termofísica, pelos equipamentos e instalações;

Aos professores César José Deschamps e Amir Antônio Martins Oliveira Jr., pela orientação e dedicação, sem as quais este trabalho não obteria êxito;

Aos membros da Banca Examinadora, pela disposição em avaliar este trabalho;

Aos colegas Evandro Luiz Lange Pereira e Leonel Rincón Cancino pelos conhecimentos transmitidos ao longo da execução deste trabalho;

Aos colegas do POLO, especialmente ao amigo Rodrigo Adrián Pizarro Recabarren, pela amizade, discussões e conhecimentos compartilhados;

Ao corpo docente do Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica pelos conhecimentos transmitidos e esforço continuado na busca do saber;

A todas as pessoas que estiveram comigo durante esta jornada, meu muito obrigado.

LISTA DE SÍMBOLOS	xi
RESUMO	xv
ABSTRACT	xvii
CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO	1
1.1 Motores a combustão interna	1
1.1.1 Ciclo de operação	2
1.1.2 Componentes	4
1.1.3 Parâmetros de análise de desempenho	5
1.2 Balanço de energia em um motor	7
1.3 Gás natural	8
1.4 Modelação numérica de motores de combustão interna	11
1.5 Objetivos do trabalho	12
CAPÍTULO 2 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	15
2.1 Introdução	15
2.2 Fundamentos Teóricos de Motores a Combustão Interna	15
2.3 Modelações Numéricas	17
2.4 Investigações Experimentais	22
2.5 Enfoque do Trabalho	25
CAPÍTULO 3 – MODELAGEM MATEMÁTICA DO PROBLEMA	27
3.1 Introdução	27
3.2 Geometria do problema	27
3.3 Equações Governantes	29
3.4 Modelação da Turbulência	32
3.4.1 Modelação do Escoamento Turbulento – Média de Favre	33
3.4.2 Modelo RNG k- ϵ	36
3.4.3 Tratamento de Parede	38
3.5 Modelação da Combustão (Interação Cinética Química – Turbulência)	42
3.5.1 Frente de Combustão	43

3.5.2	Regimes de combustão turbulenta para reagentes pré-misturados	45
3.5.3	Modelo EDC (<i>Eddy Dissipation Concept</i>)	49
3.6	Condições de Contorno	53
3.7	Composição da Mistura	54
CAPÍTULO 4 – METODOLOGIA DE SIMULAÇÃO NUMÉRICA		55
<hr/>		
4.1	Introdução	55
4.2	Discretização Espacial e Temporal	55
4.3	Funções de Interpolação	57
4.4	Acoplamento Pressão-Velocidade	59
4.5	Fronteiras Móveis	59
4.5.1	Movimento do pistão	60
4.5.2	Movimento das válvulas	61
4.5.3	Metodologia de malhas (ou fronteiras) móveis	61
4.6	Condições Iniciais	63
4.7	Procedimentos de Solução	64
CAPÍTULO 5 – RESULTADOS		65
<hr/>		
5.1	Introdução	65
5.2	Análise para uma condição de operação típica	65
5.2.1	Testes de refino de malha	67
5.2.2	Análise dos aspectos gerais e locais do funcionamento do motor	71
5.3	Variações ciclo-a-ciclo	90
5.4	Avaliação da influência de parâmetros de operação do motor	92
5.4.1	Efeito do ponto de ignição	92
5.4.2	Efeito da temperatura de parede	98
5.4.3	Efeito da composição da mistura ar/combustível	104
CONCLUSÕES GERAIS		109
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS		113
<hr/>		

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Gerais

Símbolo	Descrição	Unidade
a	Braço da manivela	[m]
A	Área	[m ²]
A/C	Razão mássica ar/combustível	[adimensional]
B	Diâmetro do cilindro	[m]
c_p	Calor específico a pressão constante	[kJ/kg.K]
c_v	Calor específico a volume constante	[kJ/kg.K]
$D_{i,m}$	Coeficiente de difusão da espécie química i na mistura	[m ² /s]
Da	Número de Damköhler	[adimensional]
h	Entalpia	[kJ/kg]
h_i	Entalpia da espécie química i	[kJ/kg]
k	Condutividade térmica	[W/m.K]
k	Energia cinética turbulenta	[m ² /s ²]
Ka	Número de Karlovitz	[adimensional]
k_{eff}	Condutividade térmica efetiva	[W/m.K]
k_t	Condutividade térmica turbulenta	[W/m.K]
l	Comprimento da biela	[m]
l_O	Escala de comprimento das grandes escalas da turbulência	[m]
l_K	Escala de comprimento das pequenas escalas da turbulência	[m]
l_L	Escala de comprimento da chama laminar	[m]
L	Curso do pistão	[m]
M	Massa molar da mistura	[kg/kmol]
m_{ar}	Massa de ar	[kg]
m_{comb}	Massa de combustível	[kg]
N	Velocidade de rotação	[rpm]
p	Pressão	[bar]
P	Potência	[kW]
PCI	Poder calorífico inferior	[kJ/kg]
Pe	Número de Peclet	[adimensional]
p_{man}	Pressão manométrica	[Pa]

P_{mep}	Pressão média efetiva	[kPa]
Pr	Número de Prandtl	[adimensional]
Pr_t	Número de Prandtl turbulento	[adimensional]
q	Fluxo de calor	[MW/m ²]
r_c	Razão de compressão	[adimensional]
R	Taxa de reação química	[kg/m ³ .s]
\bar{R}	Constante universal dos gases	[J/kmol.K]
Re_t	Número de Reynolds turbulento	[adimensional]
Sc_t	Número de Schmidt turbulento	[adimensional]
sfc	Consumo específico de combustível	[g/kW.h]
t	Tempo	[s]
t_O	Escala de tempo das grandes escalas da turbulência	[s]
t_K	Escala de tempo das pequenas escalas da turbulência	[s]
t_L	Escala de tempo da chama laminar	[s]
T	Temperatura	[K]
T	Torque	[N.m]
u	Velocidade	[m/s]
u_i	Componente da velocidade na direção i	[m/s]
u_L	Velocidade de chama laminar plana	[m/s]
V	Volume	[m ³]
V_c	Volume mínimo do cilindro (volume morto)	[m ³]
V_d	Volume do cilindro deslocado pelo pistão	[m ³]
V_{ij}	Velocidade de difusão do componente i na direção j	[m/s]
V_t	Volume total do cilindro	[m ³]
W	Trabalho	[J]
y	Fração mássica	[adimensional]
y_i	Fração mássica da espécie química i	[adimensional]
z	Posição do pistão	[m]

Símbolos Gregos

Símbolo	Descrição	Unidade
α	Inverso do número de Prandtl turbulento	[adimensional]
γ	Razão entre calores específicos (c_p/c_v)	[adimensional]

δ_{ij}	Operador delta de Kronecker	[adimensional]
ε	Taxa de dissipação viscosa	[m ² /s ³]
η_t	Eficiência de conversão do combustível	[adimensional]
η_v	Eficiência volumétrica	[adimensional]
θ	Ângulo de manivela	[graus]
λ	Relação de equivalência	[adimensional]
μ	Viscosidade molecular	[Pa.s]
μ_{eff}	Viscosidade efetiva	[Pa.s]
μ_t	Viscosidade turbulenta	[Pa.s]
ν	Viscosidade cinemática	[m ² /s]
ξ	Fração volumétrica da escala de dissipação turbulenta	[adimensional]
ρ	Massa específica da mistura	[kg/m ³]
ρ_{ar}	Massa específica do ar	[kg/m ³]
τ_{ij}	Tensor tensão viscoso	[Pa]
ϕ	Variável genérica qualquer	

O gás natural é um dos combustíveis presentes na matriz energética brasileira que possui o potencial de redução na agressão ao meio ambiente, tanto na redução da emissão de poluentes gasosos (CO, NO_x, SO₃, etc.) como na redução da emissão de CO₂ por quantidade de energia gerada. No entanto, o seu uso no setor automotivo, assim como o uso de outros combustíveis alternativos, depende do correto projeto ou adaptação/regulagem dos motores ao uso deste combustível.

Na busca por ferramentas de engenharia que auxiliem no projeto e no desenvolvimento de motores a combustão interna que utilizem combustíveis alternativos, este trabalho objetiva o desenvolvimento de um modelo computacional bidimensional para a simulação de um motor a combustão interna naturalmente aspirado, com admissão de combustível e ar pré-misturados e com ignição por centelha. O gás metano é utilizado como um modelo de gás natural.

A atenção do trabalho é direcionada aos fenômenos físicos e químicos associados à dinâmica do escoamento, à combustão e à transferência de calor no interior da câmara de combustão. Assim, o modelo para a simulação do problema em questão é obtido a partir da formulação das equações que regem os diversos fenômenos físicos e químicos.

Resultados são apresentados para diversas propriedades do escoamento e da combustão, tais como a pressão e a temperatura no interior da câmara de combustão, os fluxos de massa através dos sistemas de admissão e de exaustão, as taxas de combustão e de transferência de calor nas paredes do motor, bem como os campos de velocidade e de temperatura. Analisa-se ainda o efeito de parâmetros de operação do motor através das estimativas de torque, eficiência volumétrica e de conversão do combustível, dentre outros. Os resultados são consistentes com os valores típicos observados em motores a combustão interna.

ABSTRACT

The increasing interest for less polluting energy sources and the recent availability to the final user in the Brazilian market has motivated the use of natural gas as an alternative fuel for internal combustion engine vehicles.

In the search for engineering tools to improve internal combustion engines design and optimization, the present work is focussed on the development of a two-dimensional numerical model to simulate a spark-ignition engine fuelled by a mixture of air and methane as a natural gas simplification.

Here, attention is directed to physical and chemical phenomena associated to the fluid flow, combustion and heat transfer processes that take place inside the cylinder. To this extent, the problem is formulated through several conservation and constitutive equations, from which the numerical model is then developed to predict the engine performance.

Results are provided for some physical proprieties, such as in-cylinder pressure and temperatures, mass flow rates at intake and exhaust systems, combustion rate and heat transfer rate to cylinder walls, besides velocity, turbulence intensity and temperature fields. The effects of the engine operation parameters on the engine performance are assessed through predictions of indicated power, torque and specific fuel consumption as well as volumetric and thermal efficiencies. The results were consistent with available data for production engines and show the model's potential as a research and design tool.

1.1 Motores a combustão interna

Os motores a combustão interna são máquinas térmicas nas quais a energia térmica liberada em uma reação química (combustão) é transformada em trabalho mecânico (de eixo) através de ciclos de expansão e compressão do fluido de trabalho no interior de uma câmara de combustão.

O primeiro motor a combustão interna operante que se tem notícia foi desenvolvido, aproximadamente, na década de 1860, quando J. J. E. Lenoir construiu um motor de combustão interna alternativo utilizando uma mistura de gás de carvão como combustível, queimando com ar sob pressão atmosférica para produzir trabalho de eixo. O motor, que operava sem a compressão precedendo a combustão, possuía uma potência de 5 hp e uma eficiência próxima de 5 %.

Em 1867, Nicolaus A. Otto e Eugen Langen desenvolveram um motor contendo um mecanismo que utilizava a força desenvolvida pelo pistão no movimento de expansão para auxiliar o pistão no movimento de admissão, um precursor do sistema de eixo de manivela com volante de inércia. O motor apresentou uma eficiência próxima dos 11 %. Alguns anos depois, Otto propôs um motor mais leve e compacto que operava segundo um ciclo de quatro tempos (admissão, compressão, expansão e exaustão). O primeiro protótipo deste motor funcionou pela primeira vez no ano de 1876 e apresentou uma eficiência de cerca de 14 %. No entanto, em 1884 foi encontrada uma patente francesa de 1862, até então não publicada, de autoria de Alphonse Beau de Rochas, onde eram apresentados quatro princípios básicos necessários ao projeto de um motor de quatro tempos, indicando a anterioridade deste trabalho ao desenvolvimento de Otto.

Posteriormente, diversos trabalhos foram desenvolvidos com o objetivo de aperfeiçoar os conceitos introduzidos por Beau de Rochas e Otto. Na década de 1880, Dugald Clerk e James Robson, na Inglaterra, e Karl Benz, na Alemanha, desenvolveram com sucesso o motor de dois tempos. Na Inglaterra, James Atkinson projetou um motor de alta eficiência, mas com baixa durabilidade, provando que a eficiência é uma função da razão de expansão, sendo, porém, a razão de compressão limitada pela ocorrência da detonação (*knocking*).

Em 1892, o engenheiro alemão Rudolf Diesel apresentou a patente de um novo tipo de motor a combustão interna que utilizava um sistema de injeção direta na câmara de combustão para a alimentação do combustível. Este motor permitia o uso de altas razões de compressão sem o risco de ocorrência da detonação e, assim, apresentava quase o dobro da

eficiência dos motores daquela época. Após Diesel, o maior avanço conceitual no projeto básico de motores a combustão interna é atribuído ao inventor alemão Felix Wankel, que projetou o motor rotativo, testado pela primeira vez com sucesso no ano de 1957.

1.1.1 Ciclo de operação

Em um motor a combustão interna alternativo o pistão realiza movimentos retilíneos ascendentes e descendentes no interior do cilindro com o objetivo de receber ou transferir trabalho para o eixo. A rotação contínua deste eixo promove um movimento cíclico no pistão. Os pontos que limitam o curso do pistão são conhecidos como ponto morto superior (PMS) e ponto morto inferior (PMI). No ponto morto superior, o volume do cilindro é mínimo e é conhecido como volume morto V_c . Por outro lado, no ponto morto inferior o volume do cilindro é máximo, correspondendo ao volume total V_t . A diferença entre o volume total e o volume morto é chamada de volume deslocado pelo pistão V_d . A razão entre os volumes total e morto é conhecida como razão de compressão r_c :

$$r_c = \frac{V_d + V_c}{V_c} \quad (1.1)$$

Uma parcela significativa dos motores a combustão interna opera segundo um ciclo de quatro tempos, no qual o motor produz trabalho a cada quatro cursos do pistão ou duas rotações da árvore de manivelas. Para um motor a combustão interna operando segundo o ciclo Otto, com alimentação indireta de combustível, os quatro tempos são assim descritos:

– Primeiro tempo (admissão): O pistão realiza um movimento descendente, do ponto morto superior até o ponto morto inferior, admitindo a mistura ar/combustível por meio da válvula de admissão.

– Segundo tempo (compressão): O pistão realiza um movimento ascendente, do ponto morto inferior até o ponto morto superior, fornecendo trabalho para a compressão da mistura ar/combustível. Pouco antes de atingir o ponto morto superior, a combustão é iniciada com o auxílio de uma faísca criada pela vela de ignição.

– Terceiro tempo (expansão): O pistão realiza um movimento descendente, do ponto morto superior até o ponto morto inferior, recebendo trabalho da expansão dos gases em combustão.

– Quarto tempo (exaustão): O pistão realiza um movimento ascendente, do ponto morto inferior até o ponto morto superior, realizando a exaustão dos gases queimados para a atmosfera por meio da válvula de exaustão.

Os quatro tempos de operação do motor, descritos acima, podem ser visualizados na ilustração da Figura 1.1.

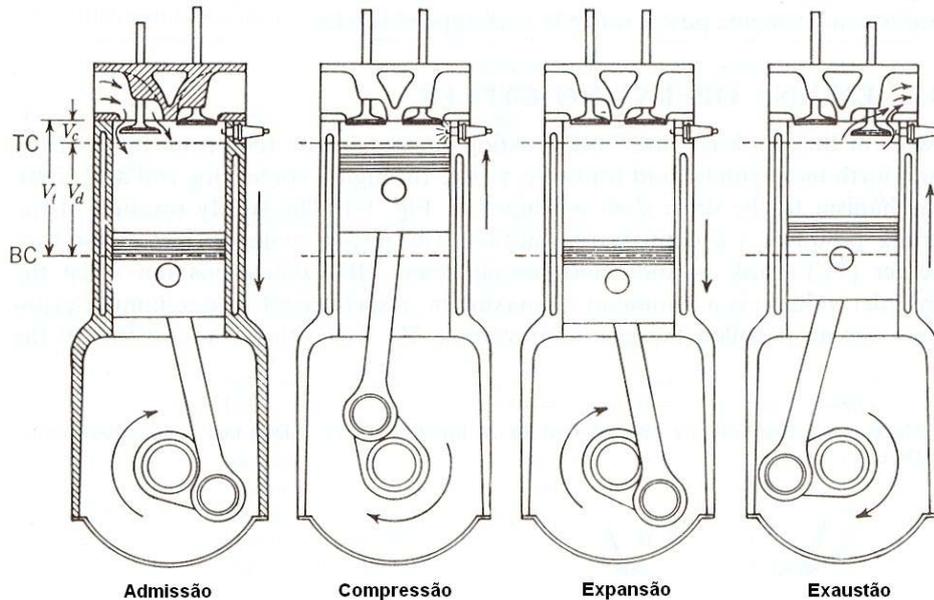


Figura 1.1 – Quatro tempos de operação do motor. Adaptado de Heywood (1988).

O ciclo ideal denominado ciclo Otto é ilustrado, para um motor naturalmente aspirado, pelo gráfico de pressão versus volume do cilindro apresentado na Figura 1.2. Este ciclo apresenta trocas gasosas com o ambiente externo além de processos de compressão, combustão e expansão.

As etapas do ciclo apresentado na Figura 1.2 são as seguintes:

- Processo de 1 a 2: Compressão da mistura ar/combustível até o volume mínimo.
- Processo de 2 a 3: Combustão a volume constante da mistura ar/combustível iniciada pela deposição de energia por uma fonte quente (faísca elétrica).
- Processo de 3 a 4: Expansão da mistura de produtos de combustão, normalmente tomados como os produtos em equilíbrio, até o volume máximo.
- Processo de 4 a 5: Equalização de pressão com o sistema de exaustão (expansão com troca de massa com o exterior) devido à abertura da válvula de exaustão.
- Processo de 5 a 6: Exaustão dos gases queimados em função do movimento ascendente do pistão (*scavenging*) terminando com o fechamento da válvula de exaustão.

– Processo de 6 a 7: Equalização de pressão com o sistema de admissão (expansão com troca de massa com o exterior) após a abertura da válvula de admissão.

– Processo de 7 a 1: Admissão da mistura ar/combustível em função do movimento descendente do pistão. O ciclo retorna ao estado 1 após o fechamento da válvula de admissão.

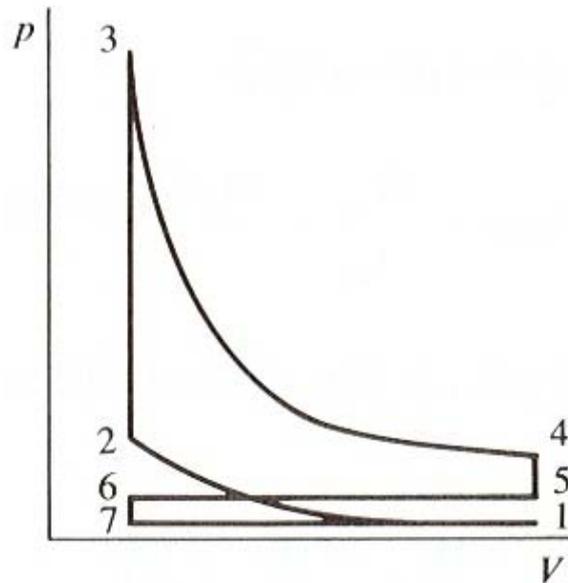


Figura 1.2 – Diagrama de pressão *versus* volume do cilindro para o ciclo ideal de quatro tempos a volume constante para um motor naturalmente aspirado. Adaptado de Heywood (1988).

1.1.2 Componentes

Os componentes dos motores a combustão interna podem ser classificados em fixos ou móveis. Os principais componentes fixos são o bloco do motor, o cabeçote, o cárter, os condutos do sistema de admissão e os condutos do sistema de exaustão. Os principais componentes móveis são o pistão (êmbolo), a biela, a árvore de manivelas (virabrequim), as válvulas de admissão e de exaustão e a árvore de comando de válvulas.

O bloco do motor é a estrutura onde são usinados os cilindros ou os furos para a colocação destes, onde encontram-se as galerias que servem como dutos de refrigeração e onde são instalados os demais componentes fixos ou móveis do motor. O cabeçote é uma espécie de tampa do cilindro contra a qual o pistão comprime a mistura de gases não-queimados e queimados. O cabeçote possui furos que servem à instalação da vela de ignição e das válvulas de admissão e de exaustão. O cárter, instalado na parte inferior do bloco, serve como um depósito para o óleo lubrificante e como uma proteção para os componentes inferiores do motor.

O pistão, geralmente fabricado em liga de alumínio, forma o fundo (móvel) da câmara de combustão e transmite a força de expansão dos gases queimados, via biela, para a árvore de manivelas. O sistema de anéis forma um mancal de deslizamento sobre a superfície do cilindro, controla a espessura do filme de óleo lubrificante, mantém o pistão centrado e sela a câmara de combustão. A árvore de manivelas (virabrequim), instalada na parte inferior do bloco, é o eixo do motor propriamente dito. O conjunto biela – virabrequim é o responsável pela transformação do movimento retilíneo do pistão em movimento rotativo do virabrequim.

A árvore de comando de válvulas tem como objetivo controlar e definir o perfil de abertura e fechamento das válvulas de admissão e de exaustão, respectivamente, nos tempos adequados de abertura e fechamento. A válvula de admissão permite a entrada da mistura ar/combustível no interior do cilindro, enquanto a válvula de exaustão permite a saída de gases queimados da combustão do interior do cilindro.

O sistema de admissão, fabricado em alumínio, ferro fundido ou plástico, e o sistema de exaustão, geralmente fabricado em ferro fundido, servem como coletores para a admissão da mistura ar/combustível e para a exaustão dos gases queimados, respectivamente. Fazem ainda parte do sistema de admissão a válvula borboleta, os injetores de combustível, o filtro de ar e alguns plenuns para controle dinâmico de pressão. Completam o sistema de exaustão conversores catalíticos de poluentes, silenciador e duto de descarga. O estado do fluido em escoamento no sistema de admissão e exaustão é monitorado continuamente por sensores de temperatura, pressão e concentração de oxigênio (sonda lâmbda), permitindo o controle dinâmico do motor através da central eletrônica.

1.1.3 Parâmetros de análise de desempenho

Os parâmetros globais de desempenho do motor visam quantificar o torque/potência desenvolvido, o consumo do motor e a emissão de poluentes. A seguir são apresentados os parâmetros indicados de desempenho do motor.

O trabalho indicado desenvolvido pelo pistão W [J] é dado pela integral de $p dV$ ao longo do ciclo executado pelo motor, podendo ser expresso como

$$W = \oint p_{man} dV \quad (1.2)$$

onde p_{man} é a pressão manométrica média no interior do cilindro.

O torque indicado T [N.m] para um motor de quatro tempos é dado por

$$T = \frac{W}{720} \quad (1.3)$$

A potência indicada P [W] para o motor de 4 tempos é definida como

$$P = \frac{W \cdot N}{120} \quad (1.4)$$

onde N é a velocidade de rotação do motor em rotações por minuto.

A pressão média efetiva indicada P_{mep} [Pa] é definida por

$$P_{mep} = \frac{W}{V_d} \quad (1.5)$$

onde V_d é o volume do cilindro deslocado pelo pistão.

A pressão média efetiva é uma medida do trabalho desenvolvido por volume deslocado e fornece uma medida da qualidade do projeto do motor quanto ao desenvolvimento de potência.

As eficiências volumétrica η_v e de conversão do combustível η_f são definidas de acordo com as seguintes relações:

$$\eta_v = \frac{m_{ar}}{\rho_{ar} V_d} \quad (1.6)$$

$$\eta_f = \frac{W}{m_{comb} PCI} \quad (1.7)$$

onde m_{ar} e m_{comb} são, respectivamente, as massas de ar e de combustível admitidas pelo cilindro e PCI é o poder calorífico inferior do combustível.

Neste trabalho, a massa específica do ar ρ_{ar} , que serve como referência no cálculo da eficiência volumétrica, é calculada para uma massa molar de ar de 28,84 kg/kmol, para uma temperatura de 298 K e para uma pressão absoluta de 101325 Pa. O poder calorífico inferior do combustível PCI , que serve como referência no cálculo da eficiência de conversão do combustível, refere-se ao metano e tem valor igual a 50 MJ/kg.

A eficiência volumétrica representa a capacidade de enchimento do cilindro enquanto a eficiência de conversão do combustível representa a capacidade de conversão da energia térmica do combustível em trabalho líquido pelo motor.

Por fim, o consumo específico de combustível indicado sfc [g/kWh] é representado por

$$sfc = \frac{m_{comb} N}{P} \quad (1.8)$$

O consumo específico fornece uma medida do consumo de combustível necessário, na unidade de tempo, para o desenvolvimento da potência pelo motor. Este parâmetro é uma medida da qualidade do projeto do motor quanto ao consumo de combustível.

1.2 Balanço de energia em um motor

O balanço de energia em um motor a combustão interna pode ser exemplificado através da Figura 1.3.

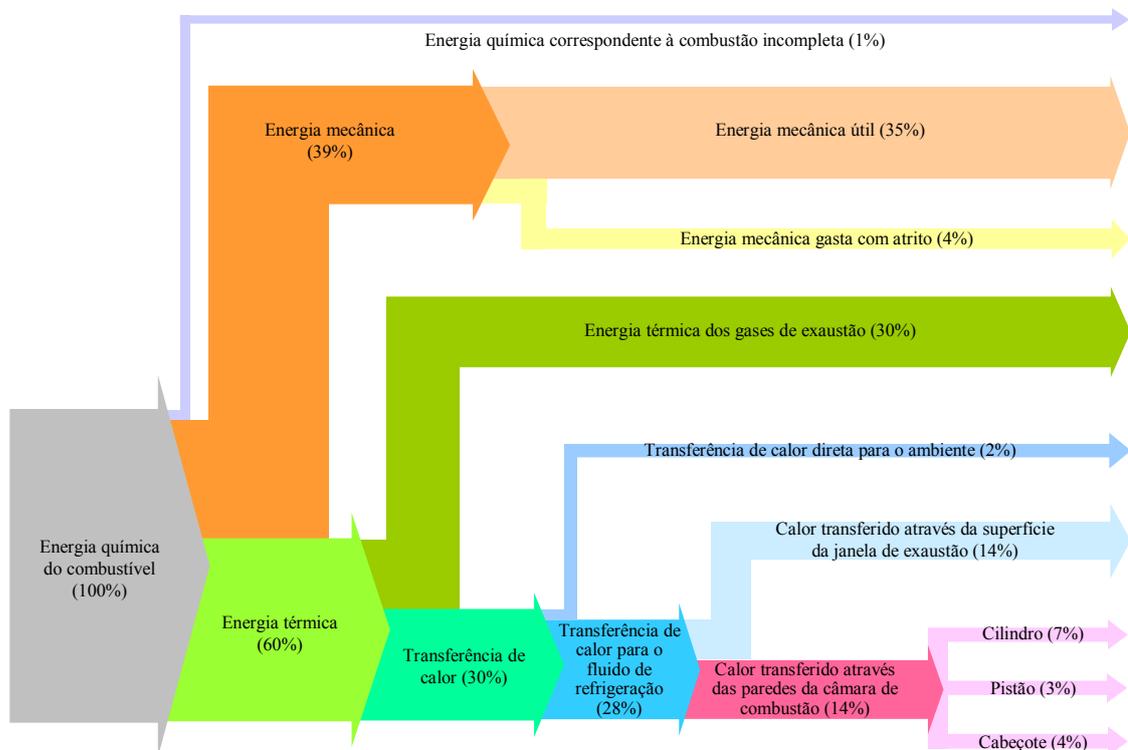


Figura 1.3 – Conversão de energia em motores a combustão interna de 4 tempos com ignição por centelha (valores médios) (Heywood, 1988).

Verifica-se na Figura 1.3 que a maior parte da energia química do combustível é transformada em energia térmica pelo motor. Metade desta energia térmica, cerca de 30%, é liberada através dos gases de exaustão, enquanto a outra metade desta energia é transferida para o ambiente e para o fluido de refrigeração através do bloco e dos canais de refrigeração do motor, respectivamente. A outra grande parcela da energia química do combustível é transformada em energia mecânica pelo motor. Do total de, aproximadamente, 39% desta energia, 4% é gasta com o atrito dos componentes mecânicos do motor, enquanto 35% é transformada realmente em energia mecânica útil.

Como este trabalho tem por objetivo modelar os processos internos ao cilindro, o modelo será capaz de captar a energia mecânica útil (35%), a energia térmica dos gases de exaustão (30%) e o calor transferido através das paredes da câmara de combustão (14%) do motor, ou seja, cerca de 79% da energia química total disponibilizada pelo combustível.

1.3 Gás natural

O gás natural é definido como uma mistura de hidrocarbonetos parafínicos leves contendo, predominantemente, metano. Em menor proporção, possui compostos como etano, propano e outros hidrocarbonetos de maior peso molecular (podendo chegar a faixa de hidrocarbonetos com até doze moléculas de carbono, dependendo da sua origem). O gás natural, como o próprio nome indica, é uma substância gasosa nas condições ambiente de temperatura e pressão, apresentando normalmente baixos teores de contaminantes tais como nitrogênio, dióxido de carbono, água e compostos sulfurados, e também com raras ocorrências de gases nobres (hélio e argônio). A diversidade na composição do gás natural bruto pode ser verificada através da Tabela 1.1, na qual é apresentada a composição do gás natural bruto encontrado em diferentes países.

Da mesma forma como o petróleo, o gás natural pode ser encontrado em reservatórios subterrâneos (rochas porosas), tanto em terra quanto sob o mar. Quando é encontrado em um reservatório junto ao petróleo, o gás natural é chamado de gás natural associado. Quando o reservatório contém pouca ou nenhuma quantidade de petróleo, o gás natural é dito não associado.

Para adquirir as características comerciais desejadas, o gás natural bruto passa por um tratamento que retira as impurezas e separa os hidrocarbonetos de maior peso molecular, passando então a ser chamado de gás natural comercial. A composição do gás natural comercial é variada e depende da composição do gás natural bruto, do mercado atendido, do uso final e do produto gás que se deseja. Além disto, este gás é especificado segundo o seu

teor de enxofre total, de gás sulfídrico, de gás carbônico e de gases inertes, o seu ponto de orvalho da água e dos hidrocarbonetos e o seu poder calorífico.

Tabela 1.1 – Composição do gás natural bruto em algumas regiões produtoras em diferentes países. A *densidade* é avaliada nas condições normais de temperatura e pressão (CNTP).

Adaptado de Gasnet.

País / Campo	COMPOSIÇÃO EM % VOLUME						Densidade	Poder Calorífico Superior (MJ / Nm ³)
	Metano CH ₄	Etano C ₂ H ₆	Propano C ₃ H ₈	C ₄ e Molares	CO ₂	N ₂		
USA/Ranh	61,8	5,8	3,4	2,2	0,1	6,9	-	42,7
USA/Rohrlevr	75,0	24,0	-	-	-	1,8	-	46,7
Canadá	69,5	4,3	1,8	1,8	0,6	2,8	-	43,4
Rússia	97,8	0,5	0,2	0,1	0,1	1,3	-	39,6
Austrália	76,0	4,0	1,0	1,0	16,0	2,8	-	35,0
França	69,2	3,3	1,0	1,1	9,8	0,6	-	36,6
Alemanha	74,0	0,8	-	-	17,8	7,5	-	29,9
Holanda	60,2	2,9	0,4	0,2	0,9	14,4	0,690	31,4
Pérsia	66,0	14,0	10,5	7,0	1,5	1,8	0,670	52,3
Már do Norte	94,7	3,0	0,5	0,4	0,1	1,3	0,590	36,6
Argélia	76,0	6,0	3,3	4,4	1,9	6,4	-	46,2
Venezuela	78,1	9,9	5,5	4,9	0,4	1,2	0,702	47,7
Argentina	95,0	4,0	-	-	-	1,8	0,578	40,7
Bolívia	98,8	6,1	1,2	0,0	0,5	1,5	0,607	38,6
Chile	98,0	6,6	2,1	0,6	-	-	0,640	45,2
Brazil								
Rio de Janeiro	66,44	6,7	2,26	0,46	0,34	0,6	0,623	40,22
Bahia	66,96	9,17	0,42	-	0,85	1,2	0,615	39,25
Alagoas	76,9	10,1	5,8	1,67	1,15	2,02	-	47,7
Rio Grande do Norte	63,48	11	0,41	-	1,95	3,16	0,644	38,54
Espirito Santo	64,8	6,9	3,0	0,9	0,3	1,58	0,664	45,4
Ceará	76,05	6,0	7,0	4,3	1,06	1,53	-	52,4

O gás natural apresenta, à pressão atmosférica, uma temperatura de mudança de fase para o estado gasoso próxima a -161°C e uma massa específica média igual a $0,74\text{ kg/m}^3$. O gás natural é considerado um bom combustível para motores a combustão interna em função do seu alto número de octanas (entre 120 e 130), quando comparado ao número de octanas da gasolina comercial (entre 83 e 93). Desta forma, para um motor a combustão interna trabalhando com uma razão elevada de compressão existe um risco menor de problemas com combustão anormal, tais como a detonação.

O gás natural apresenta também uma alta temperatura de auto ignição (mistura estequiométrica a pressão atmosférica) (540 °C) em comparação à gasolina (257 °C), o que diminui o risco de explosão em caso de vazamentos. Por fim, o gás natural apresenta baixa emissão de CO₂ por unidade de energia térmica produzida, em comparação à combustão de outros hidrocarbonetos, conforme pode ser observado no gráfico da Figura 1.4, na qual o gás natural é representado pelo metano (CH₄). Isto ocorre devido à alta relação hidrogênio/carbono (igual a 4) presente no CH₄ que é a maior entre todos os hidrocarbonetos.

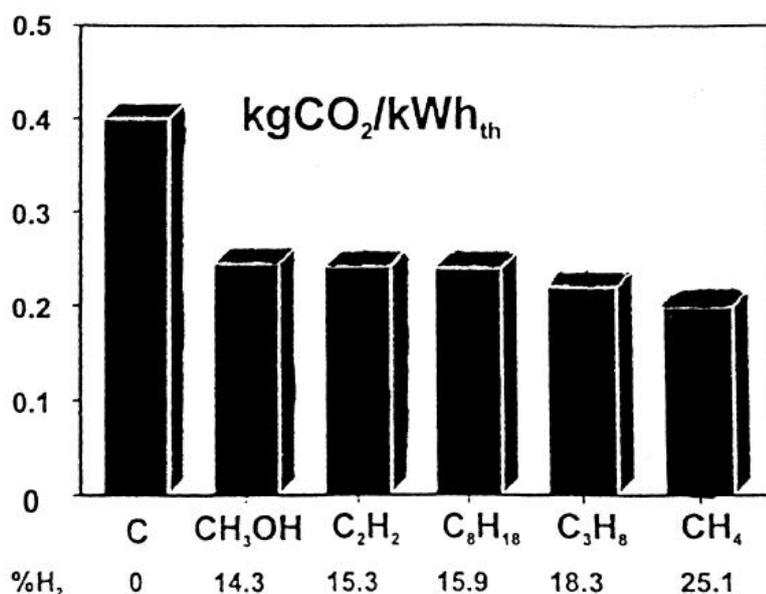


Figura 1.4 – Massa de CO₂ liberado por massa de calor produzido.

Adaptado de Das *et al.* (2000).

Por sua vez, o gás metano, maior constituinte em volume do gás natural, apresenta, à pressão atmosférica, uma temperatura de mudança de fase do estado líquido para o estado gasoso próxima a -183°C e uma massa específica igual a 0,72 kg/m³. O metano apresenta ainda uma temperatura de auto ignição (mistura estequiométrica a pressão atmosférica) igual a 600 °C.

Finalmente, a utilização do gás natural como combustível é reforçada pela disponibilidade de suas reservas mundiais, como pode ser visto através da Figura 1.5. Verifica-se no mapa que as regiões do Oriente Médio e da Europa e Ex-União Soviética respondem por cerca de 75% de todas as reservas mundiais, enquanto que as Américas Central e do Sul respondem por apenas 3,9% destas reservas. No Oriente Médio, os países com as maiores quantidades de reservas de gás natural provadas são o Catar e o Irã, com aproximadamente 25,8 e 26,8 trilhões de m³ de gás, respectivamente. Por sua vez, na Europa

e Ex-União Soviética, a Rússia é o país que mais se destaca, contando com reservas de gás natural da ordem 47,8 trilhões de m³.

No Brasil, as maiores reservas estão concentradas nos estados do Rio de Janeiro e do Amazonas, que possuem aproximadamente 47% e 17% das reservas provadas de gás natural do país, respectivamente. No entanto, o Brasil ainda é um país que possui uma quantidade inexpressiva de gás natural em reservas provadas, cerca de 310 bilhões de m³, frente às reservas mundiais que aproximam-se da ordem de 179,83 trilhões de m³ de gás natural (ANP, 2006).

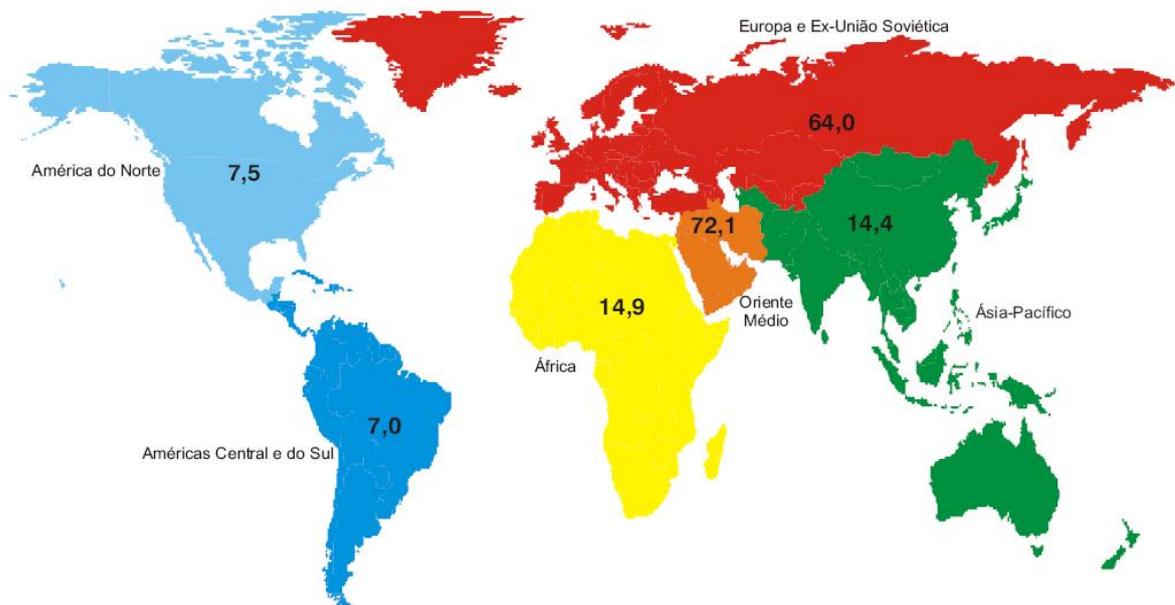


Figura 1.5 – Reservas provadas de gás natural, segundo regiões geográficas, em 31/12/2005 (trilhões de m³). Adaptado de ANP (2006).

1.4 Modelação numérica de motores de combustão interna

A modelação numérica de motores de combustão interna tem por objetivo auxiliar a engenharia de motores em diferentes níveis de projeto. A modelação numérica pode ser útil de diversas formas: como ferramenta de análise para o completo entendimento dos processos envolvidos no motor, como precursora aos testes experimentais, na avaliação de diferentes concepções de projeto ou fornecendo conhecimento para a proposição de inovações. Também, encontra relevância na engenharia de combustíveis, fornecendo parâmetros para a comparação do desempenho de diferentes potenciais componentes de misturas.

A abordagem numérica pode ser dividida, por sua natureza, em duas categorias: termodinâmica e fluido-dinâmica. A modelação termodinâmica pode ser executada, por

exemplo, na ausência de escoamento, porém, levando em conta as características da geometria do problema. A modelação fluido-dinâmica possui a habilidade de modelar o escoamento de gases em geometrias complexas. No entanto, pela maior complexidade ligada à modelação fluido-dinâmica, todas as características a ela ligadas, tais como: geometria, modelos e sub-modelos físicos, devem ser bem concebidos para que os resultados sejam compatíveis com o fenômeno investigado.

Os principais componentes de um modelo multidimensional para motores de combustão interna são:

- Modelos ou equações matemáticas para a descrição dos processos do escoamento, da combustão e da transferência de calor, com especial atenção à modelação da turbulência;
- Procedimentos de discretização para a transformação das equações diferenciais do modelo matemático em relações algébricas para as variáveis discretas em uma malha computacional;
- Algoritmo de solução, para a resolução das equações algébricas;
- Código computacional para a representação do algoritmo numérico em uma linguagem computacional.

Neste trabalho, o código computacional disponibiliza os procedimentos para a discretização das equações, bem como o algoritmo para a solução das mesmas. Mais detalhes sobre estes itens são discutidos ao longo do trabalho.

1.5 Objetivos do trabalho

O presente trabalho tem por objetivo analisar, através de uma metodologia de simulação numérica, os aspectos relacionados à dinâmica dos fluidos, à transferência de calor e à combustão de um motor a combustão interna com ignição por centelha, naturalmente aspirado, com injeção indireta e operando com o combustível gás metano. Esta análise é realizada por meio da metodologia de volumes finitos, disponibilizada pelo código computacional Fluent (Fluent, 2006). O emprego de um código comercial como ponto de partida permite que uma maior dedicação seja direcionada à análise do fenômeno físico.

O trabalho divide-se em cinco capítulos. O capítulo 2 apresenta uma revisão bibliográfica dos trabalhos experimentais e numéricos relacionados ao tema proposto nesta dissertação. O capítulo 3 apresenta a geometria do problema, as equações e os modelos matemáticos que descrevem os fenômenos físicos presentes no motor de combustão interna, bem como as condições de operação empregadas na simulação. O capítulo 4 apresenta, por

sua vez, as discretizações espacial e temporal das equações governantes, as funções de interpolação e o acoplamento pressão-velocidade aplicado na solução do sistema de equações algébricas. No capítulo 4 discute-se também o mecanismo de movimentação da geometria, além da metodologia de utilização de fronteiras móveis e os procedimentos de solução para a simulação numérica. Por fim, o capítulo 5 apresenta os resultados e as discussões de testes realizados para a validação da solução numérica, bem como para a simulação de diferentes condições de operação do motor.

2.1 Introdução

O presente capítulo tem como objetivo revisar a literatura que abrange o tema desta dissertação. Para isso, são revisados trabalhos com enfoque nos fundamentos da mecânica dos fluidos, combustão e transferência de calor associados a motores de combustão interna, bem como trabalhos experimentais e/ou em simulações numéricas para motores de combustão interna a gás natural.

2.2 Fundamentos Teóricos de Motores a Combustão Interna

O trabalho de Gosman (1988) apresenta uma visão geral sobre a simulação numérica da dinâmica dos fluidos na indústria automobilística no final da década de 80 e nos anos anteriores. O artigo aborda as áreas de aplicação das técnicas de CFD na indústria automobilística, dentre elas, a aerodinâmica da carroceria, a ventilação do compartimento de passageiros, a refrigeração e a lubrificação de vários componentes, além da combustão e dos sistemas de admissão e exaustão do motor do veículo. Segundo Gosman (1988), para a simulação de sistemas de admissão e de exaustão as principais dificuldades estão relacionadas às complexas geometrias e ao modelo de turbulência a ser aplicado. Como o artigo data do ano de 1988, quando os recursos computacionais eram ainda muito escassos, as dificuldades para as simulações estavam principalmente relacionadas ao tempo computacional e a precisão dos resultados. Mesmo assim, resultados satisfatórios já eram encontrados para simulações envolvendo formulações bidimensionais. Exemplo disso foi o estudo de Naser (1988), onde uma simulação de válvula de admissão obteve resultados compatíveis com os dados experimentais disponíveis.

Arcoumanis *et al.* (1985) apresentam uma revisão em mecânica dos fluidos para motores a combustão interna. Os autores afirmam que a mecânica dos fluidos em motores, tanto a gasolina quanto a diesel, desempenha dois papéis principais: o primeiro é a preparação da mistura ar/combustível para a combustão e o segundo é o controle da combustão por meio da interação entre as pequenas e as grandes escalas (turbulência). O artigo analisa a influência da mecânica dos fluidos para o escoamento no interior do cilindro com base nos conhecimentos já existentes, nos dados experimentais e nos cálculos computacionais.

Os autores apresentam as características comuns ao escoamento no interior do cilindro, bem como os métodos de medição de suas propriedades. Ainda são relacionados os

aspectos positivos e negativos dos grupos básicos de simulação numérica (zero-dimensional, unidimensional e multi-dimensional). Segundo os autores, as limitações dos modelos multi-dimensionais estão ligadas ao refinamento requerido para a malha computacional, ao estágio de desenvolvimento dos modelos de turbulência e ao custo computacional, tanto de processamento como de armazenamento de dados. Naturalmente, a limitação devido ao custo computacional tem sido reduzida drasticamente ao longo do tempo, à medida que novas gerações de computadores são desenvolvidos. Da mesma forma, as limitações dos modelos de turbulência são atualmente menores, devido ao surgimento de novas propostas e ao avanço dos recursos computacionais, o que permite que modelos mais elaborados sejam adotados na análise de escoamentos geometricamente complexos.

Heywood (1987) apresenta, seguindo a linha de Arcoumanis *et al.* (1985), aspectos relacionados à dinâmica dos fluidos no interior de um motor de combustão interna. O artigo aborda, primeiramente, aspectos relacionados aos ciclos de operação dos motores de combustão interna, bem como à natureza dos processos de ignição por compressão e centelha. São discutidas também as características do escoamento através de válvulas de motores, de quatro e de dois tempos. Além disto, é analisada a natureza do escoamento médio dentro do cilindro e a influência das válvulas na criação do *swirl* e na lavagem do cilindro. O artigo aborda as características relativas à turbulência e apresenta ainda os aspectos relacionados ao escoamento próximo à parede do cilindro, em função de sua importância na troca de calor entre a parede e a mistura queimada.

Para um motor a ignição por centelha, Heywood (1987) afirma que movimentos que induzam o aumento da turbulência dentro do cilindro como, por exemplo, o *swirl*, devem ser mais estudados em função do seu efeito no desenvolvimento de uma queima mais rápida e de uma maior área de chama. No entanto, níveis de quantidade de movimento e turbulência excessivos resultam em maior perda de calor para as paredes do cilindro, podendo ocasionar a extinção localizada da queima por excesso de taxa de deformação da frente de chama.

Heywood (1987) aponta que o estudo dos comportamentos do escoamento médio e da turbulência no interior do cilindro, bem como o estudo da aplicação de modelos de dinâmica dos fluidos computacional são fundamentais para um melhor entendimento dos motores de combustão interna. Em relação à dinâmica dos fluidos computacional, o autor cita como uma das principais dificuldades a obtenção de resultados de qualidade, visto que, naquela época, a simulação numérica tridimensional estava apenas começando e dados experimentais necessários para a validação dos modelos numéricos eram escassos. Outro problema importante para a modelação computacional do fenômeno recaía na incerteza originada pelo

acoplamento entre os modelos de mecânica dos fluidos e os processos relacionados à combustão.

Westbrook *et al.* (2005) apresentam uma revisão dos últimos 50 anos sobre a análise computacional da combustão. O artigo mostra a evolução da simulação numérica da combustão, juntamente com a evolução dos computadores e dos códigos de simulação em combustão, cinética química e dinâmica dos fluidos, tais como KIVA, HCT e Chemkin. Segundo os autores, há a possibilidade de modelação parcial ou total da combustão. A modelação parcial visa a simulação de um processo específico, sem que exista a necessidade de simular outros processos concomitantes. A modelação total tem como objetivo simular tantos processos quantos forem necessários para o problema em questão. No entanto, para que isso seja possível computacionalmente, o grau de complexidade do problema deve ser reduzido através de hipóteses simplificativas. Os autores citam, como exemplo, a simulação da dinâmica dos fluidos em um motor, em que são usadas simplificações nos modelos de turbulência e nos submodelos de cinética química. Além disto, por vezes, não são usados submodelos para a radiação e a geometria do problema é simplificada para uma abordagem bidimensional.

2.3 Modelações Numéricas

Cartellieri *et al.* (1994) desenvolveram um novo tipo de câmara de combustão para operar em um motor de combustão interna movido a gás natural. O trabalho objetiva o projeto de um motor com menores índices de emissões de poluentes e com um desempenho semelhante ao de um motor de combustão interna movido a diesel. O artigo descreve como a dinâmica dos fluidos computacional pôde ser utilizada no desenvolvimento de uma nova câmara de combustão. Desta forma, partindo de um pistão com topo escavado, os autores criaram dois novos pistões com mais de uma reentrância escavada no topo, chamados então de câmara TRI-FLOW. O motor utilizado para os testes experimental e numérico foi um motor diesel de 9,6 litros e 6 cilindros, com uma razão de compressão de 12:1, convertido para trabalhar com uma mistura pobre de gás natural.

O código FIRE, adotado para a modelagem CFD do problema, resolve as equações da conservação da massa, da quantidade de movimento, da energia e do modelo de turbulência $k-\epsilon$. A combustão é modelada através de uma variável de progresso da reação que se baseia em uma fração de mistura e em uma função probabilidade densidade. A simulação não é realizada para os 720° de um ciclo completo do motor, pois é iniciada apenas em um ângulo de manivela igual a 220° . O motor simulado operava a uma velocidade de 2.000 rpm, com

uma relação de equivalência igual a 1,6. A simulação forneceu resultados para a velocidade média e a energia cinética turbulenta dentro do cilindro, além da taxa de reação e do calor liberado pela combustão. Outros dados, importantes para a análise da câmara de combustão, tais como a pressão dentro do cilindro, a eficiência térmica e a pressão média efetiva foram obtidos anteriormente por meio experimental.

Por meio da simulação numérica e dos dados experimentais, Cartellieri *et al.* (1994) concluíram que a estabilidade da combustão, para o motor operando com uma mistura pobre, parece ser afetada diretamente pela velocidade do escoamento médio na região da centelha, antes e depois da ignição. O crescimento inicial da chama, na região da centelha, mostrou ser afetado pela velocidade do escoamento médio (quanto menor, melhor) e pela energia cinética turbulenta (quanto maior, melhor). Por fim, os autores também concluíram que a taxa de liberação de calor no principal período da combustão é principalmente afetada pelo nível da energia cinética turbulenta média no cilindro. Quanto maior a energia cinética turbulenta média no cilindro, maior é o pico de calor liberado e menor é o tempo de duração da combustão.

Zhang *et al.* (1998) investigaram os efeitos do *swirl*, da geometria da câmara de combustão e da localização da vela (centelha) sobre a taxa de queima e o desempenho geral de dois motores, de 2,2 e 4,3 litros, operando com gás natural em uma relação de equivalência igual a 0,7. A simulação foi conduzida com o auxílio de dois softwares: KIVA, para a simulação no interior da câmara de combustão, e WAVE, para a simulação no restante do motor. O gás natural foi simplificado como metano e o modelo de combustão utilizado incluiu os efeitos da turbulência e da taxa média de reação. Os autores apresentaram resultados na forma de liberação cumulativa de calor pelo motor, fluxo de calor pelas paredes do cilindro e energia cinética turbulenta. A melhor posição encontrada para a vela de ignição foi a localizada na periferia do cilindro. Apesar de haver um acréscimo no fluxo de calor pelas paredes do cilindro, visto que as mesmas são bem mais refrigeradas do que o cabeçote, comparado com as duas outras localizações simuladas, naquele local a queima se processa mais rapidamente. Zhang *et al.* (1998) encontraram uma diferença de apenas 1% entre o consumo específico do motor simulado em relação àquele indicado por dados experimentais. Na avaliação dos autores, os softwares KIVA e WAVE apresentaram-se como uma ferramenta confiável para a simulação da combustão, dinâmica dos fluidos e transferência de calor para o motor, visto que os resultados apresentaram boa concordância com os dados experimentais.

Thobois *et al.* (2003) realizaram um trabalho de modelagem numérica com o objetivo de analisar diferentes composições de gás natural, em comparação ao isoctano, utilizadas

como combustíveis em um motor de combustão interna e ignição por centelha. O trabalho foi dividido em duas partes: uma modelagem unidimensional (1-D) para a obtenção das velocidades de chama de cada um dos gases e uma modelagem bidimensional (2-D), segundo uma geometria axissimétrica, para a obtenção de parâmetros de performance do motor. A modelagem levou em conta a geometria de um motor a gasolina de 1,75 litros com duas razões de compressão, iguais a 10,5:1 e a 12,5:1. A simulação foi realizada para uma velocidade de 2.000 rpm, em uma carga média, com avanço de ignição igual a 37° para o isoctano e igual a 58° para os diferentes tipos de gás natural, dentre eles um combustível contendo apenas metano em sua composição. Os diferentes combustíveis utilizados na simulação obedeceram a uma relação de mistura ar/combustível estequiométrica.

A partir de dados para velocidades de chama laminar obtidas com o auxílio da modelagem 1-D, via código PREMIX do pacote ChemKin, a modelagem 2-D foi então realizada com o código KIVAII-GSM. A simulação foi realizada em uma malha computacional com aproximadamente 2.000 volumes para 120° de ângulo de manivela (60° antes do ponto morto superior até 60° depois do ponto morto superior). O modelo de combustão utilizado é uma extensão do modelo CFM (*Coherent Flame Model*) que prediz a propagação da chama em um meio estratificado. A ignição foi modelada como a deposição de uma frente de chama no momento em que o núcleo de ignição atinge um ponto crítico. Finalmente, o acoplamento entre a chama e os efeitos da turbulência foi descrito pelo modelo ITNFS (*Intermittent Turbulent Net Flame Stretch*).

Thobois *et al.* (2003) apresentam resultados para a pressão média efetiva, o consumo específico de combustível e a taxa de reação para cada combustível utilizado. Foram também apresentados resultados para a pressão média efetiva e para a taxa de reação em função da variação da intensidade turbulenta inicial, da razão de compressão e da fração de gases de recirculação. Os resultados apontam que o motor movido a metano apresenta um ganho de 20% no consumo específico de combustível (ou seja, uma redução do consumo específico de combustível), em contra-partida há uma perda de apenas 5% na pressão média efetiva, em comparação ao motor movido a gasolina. Os autores atribuíram este ganho no consumo específico à alta razão hidrogênio/carbono apresentada pelo gás metano (4) em comparação ao isoctano (2,25). Na variação da intensidade turbulenta inicial, verificou-se que a taxa de conversão de combustível aumenta com o aumento da intensidade turbulenta para os quatro combustíveis analisados. Porém, apesar do aumento que a intensidade turbulenta inicial provoca na pressão média efetiva, a mesma rapidez da taxa de reação ocasiona um efeito negativo para trabalho realizado pelo motor, visto que o tempo de ignição é mantido constante. O mesmo comportamento é verificado quando da mudança da razão de compressão

do motor. Apesar do aumento da pressão média efetiva, em função do aumento da razão de compressão, a diminuição da taxa de conversão do combustível contrabalança este efeito em função do tempo de ignição ser mantido constante.

Um exemplo atual da modelagem da dinâmica dos fluidos computacional de motores de combustão interna é o trabalho desenvolvido por Fyhr *et al.* (2004). Nesse trabalho, os autores simularam dois motores de combustão interna: um motor diesel supercarregado com um sistema turbina-compressor e um motor a gasolina naturalmente aspirado, ambos de cinco cilindros em linha com um volume de 2,4 litros. Partindo do fato de que um motor é simulado atualmente por meio de dois tipos de simulação, uma 1-D para o escoamento no motor e uma 3-D para cada componente do motor em separado, os autores se propuseram a simular numericamente em 3-D o motor desde o sistema de admissão (entrada de ar) até o final do sistema de exaustão (escapamento).

A geometria completa para o motor a gasolina, por exemplo, requereu uma malha tridimensional com 580.000 volumes. Partes do motor, tais como filtro de ar, catalisador e mufflers, foram tratados como meios porosos. Nenhum modelo de combustão foi incluído, porém o efeito da combustão foi expresso na equação da energia por meio de uma curva de liberação de calor obtida experimentalmente. O fluido foi tomado como ar, assumido como gás ideal, e a turbulência foi modelada pelo modelo k- ϵ . A simulação utilizou condições de contorno de fluxo de massa na entrada e de pressão na saída do sistema. As paredes do sistema de admissão e do catalisador foram consideradas adiabáticas, enquanto as demais superfícies receberam uma condição de temperatura prescrita. A simulação utilizou esquemas de discretização espacial de 2ª ordem para as variáveis principais e de 1ª ordem para os escalares. O algoritmo PISO de 1ª ordem foi empregado para a uma economia dos recursos computacionais na solução do problema transiente. Considerando que a convergência foi alcançada entre 5 e 6 ciclos de simulação e que cada ciclo, com 3000 passos de tempo, demora cerca de 16 horas para ser concluído, a simulação completa consumiu 4 dias de processamento em um cluster de 8 PCs Pentium IV 3,06 GHz.

A partir dos resultados numéricos, Fyhr *et al.* (2004) observaram que a pressão máxima na câmara de combustão era de 10 a 20% superior à apresentada por um código unidimensional utilizado para efeito de validação da análise. O valor da eficiência volumétrica também se mostrou 10% superior ao obtido em simulações unidimensionais. Segundo os autores, esta discrepância pode estar associada à incapacidade do modelo unidimensional de capturar os fenômenos físicos tridimensionais, tais como a queda de pressão nas válvulas de admissão e de exaustão, a interação de ondas de pressão em restrições devido ao catalisador e ao silenciador (*muffler*), o posicionamento da injeção de combustível e a forma como esta é

tratada nos dois modelos, etc. Porém, os autores acreditam também que o modelo de turbulência adotado na simulação tridimensional afete a contabilização das perdas na região da válvula, resultando em estimativas que podem também diferir em relação a valores medidos.

Fyhr *et al.* (2004) sugerem que este tipo de simulação em CFD sirva como fonte de dados de entrada e condições de contorno para simulações de combustão, visto que nas fases iniciais de projeto de câmaras de combustão existe uma maior dificuldade para obtenção de dados relacionados às características de combustão do motor. Porém, os autores afirmam que o tempo gasto no pós-processamento para simulações em 3-D é muito elevado, tornando o trabalho tedioso e com grande investimento de tempo. Por fim, reconhecendo as vantagens da simulação numérica como uma ferramenta de auxílio de projeto, os autores sugerem que sejam desenvolvidos trabalhos para a diminuição dos tempos de simulação e de pós-processamento, bem como o desenvolvimento de metodologias com malhas móveis para o domínio da câmara de combustão.

Tinaut *et al.* (2006) realizaram um estudo numérico com o objetivo de prever a performance de um motor de combustão interna movido por gás pobre e por outros gases de baixo poder calorífico, geralmente obtidos de biomassa sólida. A predição da performance foi feita em dois níveis. No primeiro, uma estimativa da potência do motor foi obtida através de um fator da qualidade do combustível (*Engine Fuel Quality*), visto que a composição do gás é conhecida. No segundo nível, com o auxílio de um modelo de combustão e outros dados relativos a velocidade de combustão do gás, são obtidas informações relativas à performance do motor.

Os autores fazem uso de um modelo *quasi-dimensional* de duas zonas de gases (queimada e não-queimada) para analisar os efeitos na combustão (potência mecânica, emissões de poluentes, etc.) de um motor operando em diferentes condições (composição do combustível, tempo de ignição, etc.). A simulação foi realizada em um motor de 1,6 litros, quatro cilindros, com uma razão de compressão de 9,6:1. A operação do motor foi representada por uma velocidade de 4.000 rpm, com uma mistura ar/combustível estequiométrica, com válvula borboleta completamente aberta (*Wide Open Throttle – WOT*), com atraso de ignição para o máximo torque (*Maximum Brake Torque – MBT*) e com o uso de diferentes combustíveis (gás pobre, isoocatano e metano).

O gás pobre foi avaliado segundo diferentes relações ar/combustível, enquanto os combustíveis isoocatano e metano foram avaliados segundo a relação ar/combustível estequiométrica, exceto para a pressão média efetiva, que foi apresentada para os três combustíveis segundo diferentes relações ar/combustível. Resultados foram disponibilizados

para a fração de massa queimada e para a pressão no interior do cilindro em função do ângulo de manivela, além da pressão média efetiva em função da razão ar/combustível. Os resultados indicaram que a potência de um motor operando com gás pobre é da ordem de 66% e com metano é da ordem de 85% da potência do mesmo motor operando com gasolina.

2.4 Investigações Experimentais

Johansson *et al.* (1995) e Olsson *et al.* (1995) avaliaram o uso de diferentes câmaras de combustão em um motor, originalmente a diesel, modificado para operar com gás natural e ignição por centelha. Enquanto o primeiro trabalho discute aspectos relativos à mecânica dos fluidos e à combustão, o segundo prossegue com a discussão sobre a combustão e aborda também o tema das emissões no uso das diferentes câmaras de combustão. Um motor de 1,6 litros em linha, com razão de compressão igual a 12:1, recebeu dez pistões de geometria diferentes, um de topo plano e outros nove escavados de distintas formas, para operar em regimes de velocidade de 800, 1.000 e 1.200 rpm, empregando gás natural com diferentes razões ar/combustível. O motor foi instrumentado com um sistema de velocimetria laser doppler (LDV), através de um acesso óptico à câmara de combustão, e com um transdutor de pressão. Dentre os resultados apresentados, destacam-se a taxa de liberação de calor (taxa de combustão), a velocidade média do escoamento e os níveis de turbulência.

Os autores concluíram que o escoamento médio e os níveis de turbulência no cilindro são muito afetados pelo tipo de pistão. Dos resultados também pôde-se afirmar que a taxa de liberação de calor, durante a maior parte da combustão (10-90% do calor liberado), tem uma forte correlação com a turbulência média, exceto para as misturas muito pobres. Já no período intermediário da combustão (0,5-10% do calor liberado), a taxa de combustão se correlaciona fortemente com a velocidade do escoamento médio em uma direção. Quando ambas a velocidade do escoamento médio e a turbulência média deste intervalo são usadas como parâmetros de interpretação para os resultados, é obtida uma forte correlação entre as duas variáveis e a taxa de combustão. Porém, no início da combustão (0-0,5% do calor liberado) não existe correlação entre a liberação de calor e o escoamento.

Dentre os inúmeros tipos de pistão testados, o pistão de topo plano apresentou o maior tempo de duração da combustão, quase o dobro do tempo em relação aos demais tipos de pistão. No entanto, este tipo de pistão apresentou os menores níveis de emissões associados aos melhores níveis de eficiência térmica. Embora não seja afirmado pelos autores, é provável que o aumento da turbulência ocasionado pelas reentrâncias nos outros pistões tenha sido responsável pela maior ocorrência de extinção da chama em regiões próximas às paredes,

devido ao aumento das taxas de transferência de calor, e por maior penetração de gases queimados e extinção local da chama por deformação (*flame stretch*), devido ao maior enrugamento (*wrinkling*) da frente de combustão.

Kato *et al.* (1999) desenvolveram um motor de combustão interna a gás natural comprimido com o objetivo de reduzir os níveis de emissões de poluentes e suprir a demanda atual por motores que operem com combustíveis alternativos. Sabendo que o gás natural comprimido apresenta, em comparação à gasolina, menor poder calorífico por massa de mistura estequiométrica e menor eficiência volumétrica em função do combustível a ser injetado no coletor, a simples troca de combustível, de gasolina para gás natural comprimido, provoca uma perda de potência do motor. Desta forma, o motor de quatro-tempos de 2,2 litros passou por inúmeras modificações para garantir o retorno à potência original. Por exemplo, foram realizadas modificações na razão de compressão, de 9,5:1 para 11:1, no tempo de abertura da válvula de admissão, no *lift* de ambas as válvulas, no sistema de injeção de combustível, no uso de diferentes catalisadores no sistema de exaustão, bem como no desenvolvimento de diferentes reguladores de pressão e de injeção de combustível.

Apesar das modificações, o motor movido a gás natural apresentou um desempenho inferior ao do motor a gasolina, representada por uma potência máxima de 88 kW em relação aos 97 kW do motor a gasolina. A durabilidade do motor convertido também apresentou-se insuficiente para as características de trabalho do motor a gás natural. Apesar de modificações no pistão, no cabeçote e nos assentos de ambas as válvulas de admissão e de exaustão, o desgaste associado às altas temperaturas de trabalho do gás natural e à ausência de lubricidade nos assentos de válvula que era originalmente provida pela gasolina exigem um ajuste no projeto caso o motor seja fabricado em larga escala. Apesar desses resultados negativos, os autores se mostraram satisfeitos em relação às emissões de poluentes pelo motor, visto que elas encontram-se abaixo das normas de emissões às quais o motor foi submetido.

Das *et al.* (2000) realizaram um trabalho de investigação experimental com o objetivo de comparar o efeito do gás natural comprimido e do hidrogênio, como combustíveis, sobre o desempenho de um motor de combustão interna com ignição por centelha. Os autores destacaram algumas das qualidades do gás natural comprimido, tais como maior número de octanas e maior temperatura de auto-ignição em comparação aos combustíveis tradicionais, bem como as qualidades associadas ao combustível hidrogênio. Um motor de quatro-tempos, mono-cilíndrico e naturalmente aspirado foi testado em quatro rotações: 2000, 2200, 2400 e 2600 rpm. Os resultados, apresentados em termos da eficiência térmica, da pressão média efetiva e do consumo específico de combustível, mostraram que ao utilizar o hidrogênio o motor apresenta um menor consumo específico de combustível e uma maior eficiência

térmica. Exemplo disto são os valores de eficiência térmica apresentados: 27,59% para o gás natural comprimido em comparação aos 31,19% para o hidrogênio.

Caillol *et al.* (2002) investigaram os efeitos das variações de composição do gás natural na fração de massa queimada, na velocidade de queima e nas emissões de um motor de combustão interna de quatro tempos com ignição por centelha. Os resultados foram obtidos para um motor mono-cilíndrico operando com razões relativas combustível/ar entre 0,6 e 1,2. O estudo levou em consideração o uso de quatro diferentes compostos de gás natural, desde uma composição somente com metano até uma incluindo outros gases, tais como etano, propano, butano e nitrogênio.

Os autores concluíram, com base nas medições experimentais do torque do motor, que a presença de etano na mistura leva a um aumento na performance do motor em condições de queima pobre. Para o composto de gás natural com adição de 10% de etano, em volume, em comparação ao composto sem a presença de etano, ocorreu um aumento de 35% no torque do motor. Do mesmo modo, em uma comparação das taxas de combustão calculadas numericamente foi possível identificar que a presença de etano na mistura tem sua maior influência durante os estágios iniciais da combustão. Por fim, os resultados indicaram que a taxa de combustão do gás natural, que tem como constituintes adicionais o etano, o propano, o butano e o nitrogênio, apresentou um valor máximo 10% maior do que as outras composições de gás natural que levam nenhum ou algum dos constituintes adicionais. Desta forma, a presença combinada de etano e propano apresentam influências benéficas na velocidade de queima na faixa de mistura mais pobre.

Aslam *et al.* (2006) realizaram uma investigação experimental em um motor, originalmente a gasolina, adaptado para uso com gás natural comprimido. Para este fim, os autores utilizaram um motor a gasolina de 1,5 litros naturalmente aspirado, com razão de compressão 9,2:1. Os testes foram executados em uma condição estacionária, com o motor acelerado, para uma faixa de rotação de 1.500 a 5.500 rpm e uma relação de equivalência da mistura igual a 1,06. Operando de acordo com esses parâmetros, foram medidos o torque, a potência e o consumo de combustível do motor com o uso de gasolina e gás natural comprimido. Os resultados foram reportados em termos de pressão média efetiva, do consumo específico de combustível e da eficiência na conversão do combustível.

Com base em experimentos, Aslam *et al.* (2006) concluíram que, para a operação com gás natural, o motor apresenta uma pressão média efetiva 16% menor e um consumo específico de 17-18% menor do que para a operação com gasolina. Do mesmo modo, a operação do motor perto da faixa de mistura estequiométrica ar/combustível, com o uso do gás natural, apresenta uma eficiência na conversão do combustível 2,9% maior do que com o

uso da gasolina. No entanto, os autores avaliaram que o problema no uso do gás natural como combustível veicular está ligado à sua dificuldade de armazenamento, o que acarreta em uma menor autonomia para o veículo quando comparado com o mesmo veículo movido a gasolina.

2.5 Enfoque do Trabalho

A indústria automobilística agrega valores de grande relevância, tanto do ponto de vista científico como do ponto de vista financeiro, na pesquisa e no desenvolvimento de novos motores, com base em experimentos cada vez mais avançados, bem como em simulações numéricas cada vez mais representativas de um motor real. No entanto, as dificuldades relacionadas à obtenção de dados experimentais e aos custos computacionais para soluções numéricas em motores a combustão interna indica que existe ainda a necessidade do desenvolvimento de soluções de engenharia baseadas na aplicação criteriosa de modelos físicos que reduzam os custos de análise, sem eliminar os processos físicos e químicos relevantes. O objetivo de um modelo numérico é o de reproduzir as características de operação mais relevantes de um motor, assim como as relações de causa e efeito observadas nos experimentos, permitindo então que seja utilizado como uma ferramenta de projeto, auxiliando no desenvolvimento e na análise de novas soluções.

Considerando os modelos e experimentos disponíveis na literatura, o presente trabalho visa analisar numericamente os aspectos relacionados à dinâmica dos fluidos, à transferência de calor e à combustão de um motor de combustão interna com ignição por centelha, naturalmente aspirado, com injeção indireta e operando com o combustível gás metano. A geometria do modelo desenvolvido para este fim retém as principais características deste tipo de motor, incluindo os movimentos do pistão e das válvulas. Modelos físicos e químicos são também selecionados para captar de forma adequada os principais mecanismos relacionados ao escoamentos, à transferência de calor e à combustão. A independência da malha em relação a solução numérica é avaliada através da simulação de casos operando sob condições idênticas, mas com o uso de diferentes refinamentos de malha. A modelagem desenvolvida neste trabalho pode ser estendida no futuro, tanto para incluir efeitos adicionais devido à operação do motor, como para remover algumas das hipóteses adotadas para a redução do custo computacional.

CAPÍTULO 3 – MODELAGEM MATEMÁTICA DO PROBLEMA

3.1 Introdução

Neste capítulo é apresentada a formulação do problema, representada pelo domínio de solução, pelas equações governantes e pelas condições de contorno requeridas para a sua solução. Primeiramente, a geometria simplificada do motor de combustão interna é detalhada, juntamente com as suas características ao longo do ciclo de operação. Em seguida são apresentadas as equações matemáticas que descrevem os fenômenos físicos que ocorrem com a mistura ar/combustível. Também são descritos os modelos de turbulência e de combustão necessários para o fechamento dessas equações. Por fim, são indicadas as condições de contorno adotadas para a solução do problema, bem como as diferentes condições de operação empregadas na simulação.

3.2 Geometria do problema

O problema em análise é caracterizado pela geometria de um motor de combustão interna a gás natural com ignição por centelha, naturalmente aspirado, com injeção indireta e operando em um ciclo de quatro tempos. Naturalmente, a geometria de um motor deste tipo sugere a utilização de um modelo tridimensional para a sua simulação. No entanto, a fim de reduzir o custo computacional, optou-se por uma formulação bidimensional para o modelo que fosse capaz de reproduzir as principais características do problema. Ao optar-se por um modelo bidimensional, tornou-se necessário que os sistemas de admissão e de exaustão, bem como a câmara de combustão e as válvulas, fossem representados seguindo uma geometria axissimétrica.

A Figura 3.1 apresenta uma representação esquemática da geometria adotada, enquanto a Figura 3.2 apresenta uma vista em corte, evidenciando o eixo de simetria. Fazem parte da geometria os sistemas de admissão e de exaustão, as válvulas de admissão e de exaustão e a câmara de combustão. Os sistemas de admissão e de exaustão servem como um reservatório a pressão constante (um *plenum*) juntamente com uma seção de passagem que leva a mistura não-queimada até o cilindro, no sistema de admissão, e que leva a mistura queimada para fora do cilindro, no sistema de exaustão. As válvulas de admissão e exaustão permitem a entrada e a saída da mistura para dentro e para fora do cilindro, respectivamente. A parede circunferencial da câmara de combustão representa a parede lateral do cilindro,

enquanto as paredes superior e inferior funcionam como topo do cilindro e pistão, e vice-versa, dependendo do ângulo de manivela do motor.

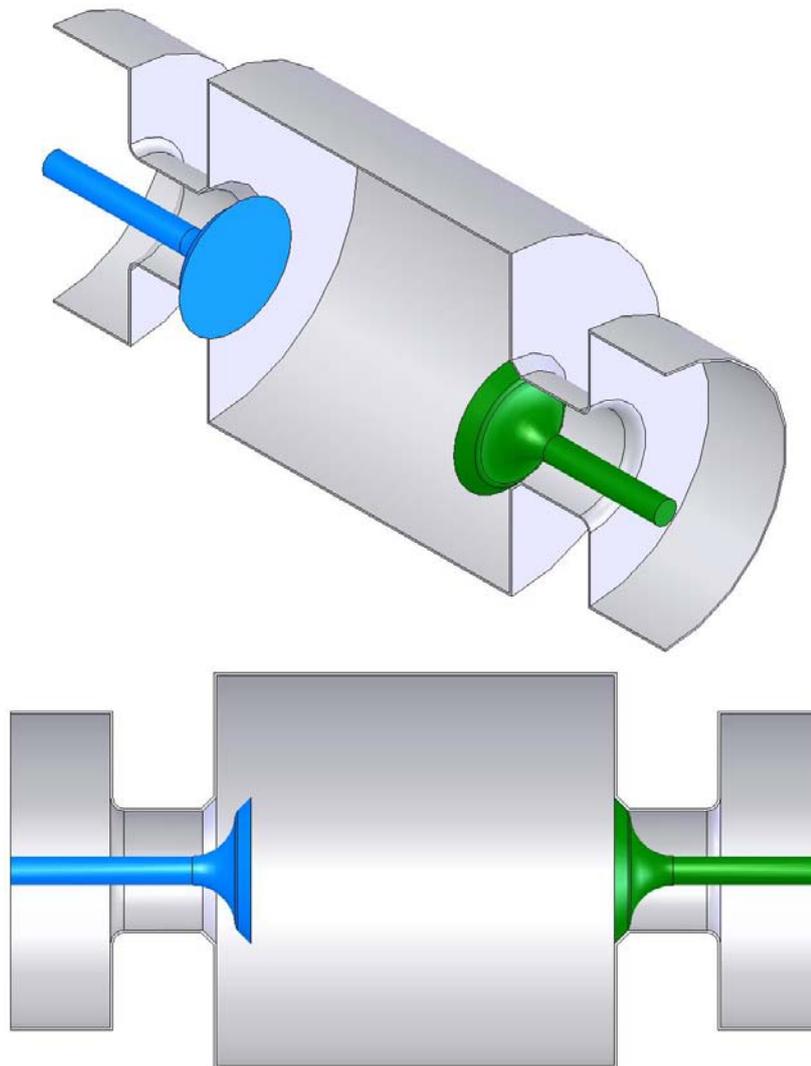


Figura 3.1 – Vista tridimensional (isométrica e vista frontal) da geometria adotada. As válvulas de admissão e exaustão são concêntricas e posicionadas de forma oposta.

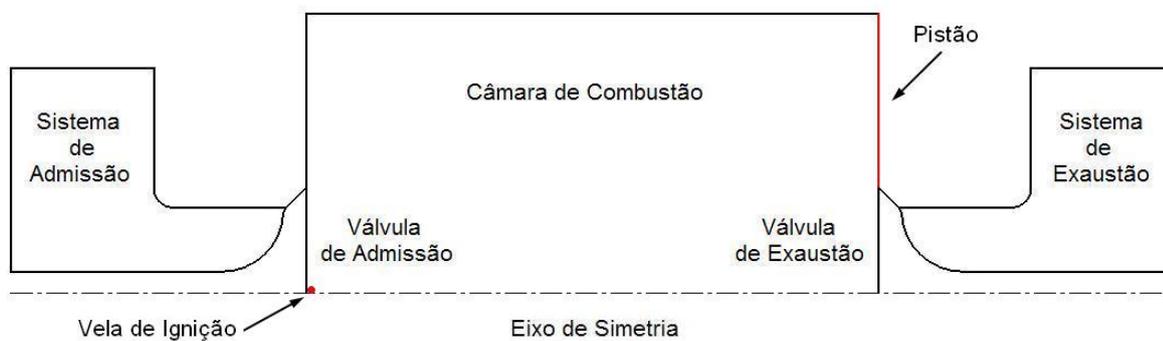


Figura 3.2 – Vista em corte para a geometria bidimensional axissimétrica.

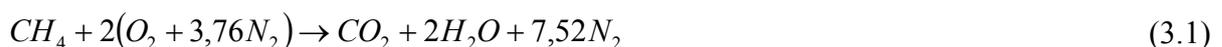
A câmara de combustão incluída na geometria é alterada de acordo com a equação que rege o movimento do pistão, tendo o seu volume variado desde o ponto morto superior até o ponto morto inferior, do ângulo de manivela igual a 0° até o ângulo igual a 180° e assim por diante até o ângulo de 720° . Por sua vez, os movimentos de abertura e fechamento das válvulas são descritos por um polinômio que relaciona a abertura da válvula (*valve lift*) em função do ângulo de manivela do motor.

A vela de ignição é posicionada no meio do topo da válvula de admissão, ou seja, na linha de simetria da geometria, conforme pode ser visto na Figura 3.2. Assim, nesta simulação, a vela de ignição assume o mesmo posicionamento de uma vela central ao cabeçote do cilindro.

3.3 Equações Governantes

Nesta seção são apresentadas as equações que modelam o fenômeno físico estudado. A dinâmica do escoamento é modelada com o auxílio das equações de conservação da massa, quantidade de movimento linear e energia, escritas de acordo com o emprego de um conceito de média estatística da turbulência. Por se tratar de um escoamento com variações significativas de massa específica, as equações de transporte são promediadas usando o conceito de média de Favre (1965). Para o fechamento das equações, emprega-se o conceito de viscosidade turbulenta, avaliada através do modelo de turbulência RNG $k-\varepsilon$, onde k é a energia cinética turbulenta e ε representa a taxa de dissipação de k . As equações de conservação para escoamentos reativos multicomponente são apresentadas, entre outros, por Bird *et al.* (1960), Warnatz *et al.* (2001), Peters (2000) e Poinso *et al.* (2001).

As equações governantes são aplicadas a uma mistura inicial de ar e metano. Essa mistura sofre, então, uma reação química que obedece a um mecanismo de cinética química global de uma etapa, com a presença de cinco espécies químicas. O mecanismo cinético global para a combustão estequiométrica de metano com ar seco padrão simplificado produzindo produtos saturados de combustão pode ser escrito como



Esta reação química descreve a reação de oxidação de uma molécula de metano em uma molécula de dióxido de carbono e duas moléculas de vapor d'água. O gás nitrogênio permanece inerte.

A equação da conservação da massa é escrita para um referencial inercial como

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (3.2)$$

onde ρ é a massa específica e u_i é a componente do vetor velocidade na direção i .

A equação da conservação da quantidade de movimento linear, também para um referencial inercial, negligenciando termos de força de corpo, é expressa como

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij}) \quad (3.3)$$

onde p é a pressão e τ_{ij} é o tensor tensão viscoso. O primeiro termo do lado esquerdo representa a variação com o tempo da quantidade de movimento linear por unidade de volume, o segundo termo representa o fluxo advectivo líquido de quantidade de movimento linear por unidade de volume, o primeiro termo do lado direito representa a força atuando sobre o volume devido ao campo de pressão, enquanto que o segundo termo está associado à difusão molecular de quantidade de movimento por unidade de volume, podendo também ser interpretado como uma força de atrito viscoso. Para um fluido Newtoniano, τ_{ij} é definido por

$$\tau_{ij} = \mu \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right] \quad (3.4)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica molecular e δ_{ij} é o operador delta de Kronecker.

A equação da conservação da massa para cada espécie química i é modelada assumindo que um modelo de Fick pode ser aplicado para a difusão molecular, negligenciando termos de difusão devido ao gradiente de temperatura (efeito de Soret) e ao gradiente de pressão, assim como a ação de forças de corpo. Desta forma, escrevendo a velocidade de difusão de massa do componente i na direção j em relação ao centro de gravidade da mistura V_{ij} , que se move com componente de velocidade u_j na direção j , por

$$y_i V_{ij} = -D_{i,m} \frac{\partial}{\partial x_j} y_i \quad (3.5)$$

a equação da conservação da massa da espécie química i torna-se

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho y_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho y_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho D_{i,m} \frac{\partial}{\partial x_j} y_i \right] + R_i \quad (3.6)$$

onde y_i é a fração mássica da espécie química i , $D_{i,m}$ é o coeficiente de difusão molecular da espécie química i na mistura, o qual é obtido a partir dos coeficientes de difusão binários, e R_i é a taxa de produção da espécie química i pelas reações químicas. O primeiro termo do lado esquerdo representa a variação com o tempo da massa de cada espécie química i , o segundo termo representa o fluxo advectivo líquido da massa de cada espécie química i , enquanto o primeiro termo do lado direito está associado aos efeitos difusivos do transporte de massa.

Por sua vez, a equação da conservação da energia, negligenciando a variação da energia potencial, o fluxo de calor por gradiente de concentração (efeito de Dufour), o fluxo de calor por radiação térmica e a potência desenvolvida por forças de corpo, é expressa na forma de entalpia por

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \sum_i y_i h_i - p + \frac{\rho u^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[u_j \left(\rho \sum_i y_i h_i + \frac{\rho u^2}{2} \right) \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[k \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_i h_i \rho D_{i,m} \frac{\partial y_i}{\partial x_j} + \tau_{ij} \cdot u_j \right] + S_h \quad (3.7)$$

onde h_i é a entalpia para a espécie química i , u é o módulo do vetor velocidade e S_h é o termo fonte que inclui o calor gerado por outra fonte volumétrica de calor. O primeiro termo do lado esquerdo é a variação com o tempo da energia e o segundo termo é o fluxo convectivo líquido de energia. O primeiro termo do lado direito está associado aos efeitos difusivos do transporte de energia, ou seja, o fluxo de calor líquido por condução, modelado de acordo com a Lei de Fourier, o fluxo de energia líquido carregado pela difusão de massa e a conversão de energia por efeitos viscosos. Observa-se que a energia térmica gerada pela combustão já está incluída na entalpia da mistura, à medida que uma certa massa de reagentes é transformada em produtos pela reação química. Desta forma, os demais efeitos de geração de calor volumétricos incluem, por exemplo, a deposição de energia local pela fâisca do sistema de ignição.

O fechamento das equações requer relações adicionais. A primeira é a equação de estado para a mistura, expressa considerando a hipótese de gás ideal:

$$\rho = \frac{pM}{\bar{R}T} \quad (3.8)$$

onde M é a massa molar da mistura, obtida através da composição da mistura e das massas molares das espécies químicas, com a utilização da Lei de Dalton, e \bar{R} é a constante universal dos gases.

Para completar a formulação, necessita-se ainda de relações expressando a dependência da entalpia de cada espécie química com a temperatura. Tais relações são fornecidas na forma polinomial (McBride *et al.*, 2002) para a entalpia de gases ideais obtida pela integração do calor específico. Finalmente, equações devem também ser incluídas para descrever a taxa de reação química em função das concentrações, temperatura e pressão. Isto será detalhado mais adiante, junto com o tratamento da interação entre a turbulência e a cinética química.

3.4 Modelação da Turbulência

Grande parte dos escoamentos encontrados em aplicações de engenharia são de natureza turbulenta, ou seja, tridimensionais e transientes. Apesar das equações de Navier-Stokes serem adequadas para a descrição do fenômeno da turbulência, a presença de estruturas de movimento turbulento, com uma larga faixa de escalas de comprimento e de tempo, requer níveis elevados de discretização espacial e temporal para a correta descrição das menores escalas. Esses níveis de discretização são adotados com o emprego da Simulação Numérica Direta (*Direct Numerical Simulation* – DNS) da turbulência. Porém, devido aos custos computacionais extremamente elevados da DNS, a sua aplicação é limitada a escoamentos turbulentos relativamente simples, ou seja, àqueles destinados a um aprofundamento do conhecimento teórico da turbulência.

Outra possibilidade para a solução numérica de escoamentos turbulentos é conhecida como Simulação de Grandes Escalas (*Large Eddy Simulation* – LES). Nesta técnica, as discretizações espacial e temporal são aplicadas somente aos maiores vórtices, enquanto os menores vórtices são aproximados pela introdução de algum modelo algébrico simples. Apesar da grande redução nos recursos computacionais, em função do uso de discretizações apenas para as maiores escalas, a Simulação de Grandes Escalas é ainda impraticável para escoamentos encontrados em situações de engenharia. Com o avanço na área de recursos computacionais, no entanto, dentro de alguns anos essa metodologia poderá ser aplicada para

a solução de escoamentos nos quais mesmo os maiores vórtices apresentam transientes rápidos (Deschamps, 1998).

3.4.1 Modelação do Escoamento Turbulento – Média de Favre

Como alternativa aos modelos DNS e LES e em função das grandes variações na massa específica da mistura, característica intrínseca do processo de combustão, emprega-se um modelo baseado na promediação estatística das equações de conservação. Para isto, utiliza-se do conceito de média de Favre, na qual qualquer propriedade do escoamento é expressa através de uma quantidade média e de outra de flutuação associada à turbulência, ambas ponderadas pela massa específica. O uso deste conceito permite que as flutuações sejam removidas das variáveis dependentes e, desta forma, permitem a utilização de hipóteses simplificativas e de malhas bem menos refinadas. Assim, escoamentos de grande complexidade podem ser estudados com menor esforço computacional.

Uma quantidade instantânea qualquer, aqui representada pela velocidade u_i , pode ser escrita, pelo conceito de média ponderada de Favre, como a soma de um valor médio \tilde{U}_i e um termo de flutuação u_i' ,

$$u_i = \tilde{U}_i + u_i' \quad (3.9)$$

A velocidade média \tilde{U}_i é definida por:

$$\tilde{U}_i = \frac{\overline{\rho u_i}}{\bar{\rho}} \quad (3.10)$$

onde $\bar{\rho}$ é o valor médio da densidade, definido conforme a proposta de Reynolds.

Como pode ser observado da relação acima, este procedimento de promediação de Favre implica que a média do produto da flutuação u_i' pela densidade instantânea ρ seja nulo:

$$\overline{\rho u_i'} = 0 \quad (3.11)$$

uma vez que

$$\overline{\rho u_i} = \overline{\rho \tilde{U}_i} + \overline{\rho u'_i} = \overline{\rho \tilde{U}_i} \quad (3.12)$$

Aplicando o conceito de média de Favre às equações da conservação da massa, da quantidade de movimento linear, das espécies químicas e da energia, tem-se o seguinte sistema de equações para as grandezas promediadas (Peters, 2000):

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\rho} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho \tilde{U}_i}) = 0 \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{U}_i}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{U}_i \tilde{U}_j}) = -\frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} - \overline{\rho u'_i u'_j} \right) \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{Y}_i}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{Y}_i \tilde{U}_j}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{\rho D_{i,m} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j}} - \overline{\rho y'_i u'_j} \right] + \tilde{R}_i \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho \sum_i \tilde{Y}_i \tilde{h}_i} - \tilde{P} + \frac{\overline{\rho \tilde{u}^2}}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\tilde{u}_j \left(\overline{\rho \sum_i \tilde{Y}_i \tilde{h}_i} + \frac{\overline{\rho \tilde{u}^2}}{2} \right) \right] = \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[k \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} - \sum_i \overline{h_i \rho D_{i,m} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j}} + \overline{\tau_{ij} \cdot u_j} - \overline{\rho h'_i u'_j} - \overline{\rho y'_i u'_j} - \overline{\rho u'_i u'_j} \cdot \tilde{u}_j \right] + \tilde{S}_h \end{aligned} \quad (3.16)$$

Considera-se que as variações da viscosidade μ , do coeficiente de difusão molecular $D_{i,m}$ e da condutividade térmica k sejam suficientemente pequenas de tal forma que seus efeitos sobre a turbulência possam ser negligenciados.

O termo $\overline{\rho u'_i u'_j}$ presente na Eq. (3.14) é chamado de tensor de Reynolds e representa a transferência de quantidade de movimento adicional causada pela turbulência. Assim, a sua modelação é necessária para que a equação da quantidade de movimento linear possa ser resolvida. Seguindo a hipótese de Boussinesq (1877), o tensor de Reynolds pode ser modelado através do conceito de viscosidade turbulenta μ_t :

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \left[\left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} \overline{\rho} \tilde{k} \delta_{ij} \quad (3.17)$$

A mesma analogia pode ser feita para os fluxos turbulentos presentes nas equações da conservação das espécies químicas e da energia:

$$-\overline{\rho y_i \dot{u}_j} = \frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \quad (3.18)$$

$$-\overline{\rho h_i \dot{u}_j} = (k_{eff} - k) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \quad (3.19)$$

Na Eq. (3.18), a difusão da espécie química é relacionada com a viscosidade turbulenta μ_t através do número de Schmidt turbulento, Sc_t . Por outro lado, a condutividade térmica efetiva, $k_{eff} (= k_t + k)$, é definida como:

$$k_{eff} = \alpha c_p \mu_{eff} \quad (3.20)$$

onde α é o inverso do número de Prandtl turbulento, sendo avaliado conforme descrito na seção 3.4.2.

Por fim, ao substituir os modelos representados pelas Eqs. (3.17), (3.18) e (3.19) nas Eqs. (3.14), (3.15) e (3.16), tem-se o seguinte conjunto de equações:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{U}_i) = 0 \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{U}_j) = -\frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} \right) \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y}_i \tilde{U}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\bar{\rho} D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right] + \tilde{R}_i \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{\rho} \sum_i \tilde{Y}_i \tilde{h}_i - \tilde{P} + \frac{\bar{\rho} \tilde{u}^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\tilde{U}_j \left(\bar{\rho} \sum_i \tilde{Y}_i \tilde{h}_i + \frac{\bar{\rho} \tilde{u}^2}{2} \right) \right] = \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[k_{eff} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} - \sum_i \tilde{h}_i \left(\bar{\rho} D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} + \bar{\tau}_{eff} \cdot \tilde{U}_j \right] + \tilde{S}_h \end{aligned} \quad (3.24)$$

A viscosidade efetiva μ_{eff} , apresentada na Eq. (3.22), é definida como a soma das viscosidades molecular, μ , e turbulenta, μ_t :

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (3.25)$$

A viscosidade turbulenta é avaliada com o uso de um modelo de turbulência a ser discutido na próxima seção.

Por fim, o tensor tensão efetivo $\bar{\bar{\tau}}_{eff}$ (*deviatoric stress tensor*), que aparece no lado direito da Eq. (3.24), é definido pela Eq. (3.26):

$$\bar{\bar{\tau}}_{eff} = \mu_{eff} \left(\frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \mu_{eff} \frac{\partial \tilde{U}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (3.26)$$

3.4.2 Modelo RNG k-ε

O modelo k-ε tem sido um dos modelos mais utilizados em simulações numéricas para escoamentos em geral. Uma variante do modelo k-ε, proposta por Orszag *et. al.* (1993), foi derivada das equações de Navier-Stokes a partir da Teoria dos Grupos Renormalizados (*Renormalization Group Theory* – RNG). Segundo Orszag *et. al.* (1993), a vantagem do modelo RNG k-ε recai no fato de que tanto as constantes como as funções nele empregadas são obtidas teoricamente, e não mais empiricamente como no caso do modelo k-ε original (Launder e Spalding, 1972). Além disto, o modelo pode ser aplicado à subcamada limite viscosa sem a necessidade da inclusão de correções nas constantes ou nas funções das equações de transporte. Orszag *et. al.* (1993) afirmam ainda que, em oposição à natureza empírica do modelo k-ε, o embasamento matemático do modelo RNG k-ε permite o seu uso em uma gama maior de escoamentos turbulentos. Alguns exemplos em que o modelo RNG k-ε apresenta melhorias em relação à formulação original do modelo k-ε, são os escoamentos com a presença de regiões de separação, linhas de corrente curvas e regiões de estagnação. O modelo RNG k-ε é também numericamente estável, possibilitando uma taxa de convergência do procedimento iterativo que resulta em um esforço computacional adicional modesto.

A viscosidade efetiva μ_{eff} apresentada na Eq. (3.25) é calculada no modelo RNG k-ε, para altos números de Reynolds, de acordo com a Eq. (3.27) a seguir:

$$\mu_{eff} = \mu + \bar{\rho} C_{\mu} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (3.27)$$

onde \tilde{k} é a energia cinética turbulenta, $\tilde{\varepsilon}$ é a taxa de dissipação viscosa de \tilde{k} e $C_{\mu} = 0,0845$.

A viscosidade turbulenta também é modelada para baixos números de Reynolds, como acontece em regiões junto a paredes sólidas. Nessas situações, a viscosidade efetiva é obtida por meio da integração da seguinte equação diferencial:

$$d\left(\frac{\bar{\rho}^2 \tilde{k}}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}} \mu}\right) = 1,72 \frac{\hat{v}}{\sqrt{\hat{v}^3 - 1 + C_v}} d\hat{v} \quad (3.28)$$

onde $\hat{v} = \mu_{eff} / \mu$ e $C_v \approx 100$.

As equações de transporte para a energia cinética turbulenta \tilde{k} e a sua dissipação $\tilde{\varepsilon}$, requeridas para a avaliação da viscosidade turbulenta, são então escritas como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \tilde{k} \tilde{U}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right) + G_k - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} - Y_M \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \tilde{U}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha_{\varepsilon} \mu_{eff} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} G_k - C_{2\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}} - R_{\varepsilon} \quad (3.30)$$

Nas equações acima, as constantes $C_{1\varepsilon}$ e $C_{2\varepsilon}$ são iguais a 1,42 e 1,68, respectivamente. As quantidades α_k e α_{ε} , representando o inverso do número de Prandtl efetivo para \tilde{k} e $\tilde{\varepsilon}$, são calculadas de acordo com a seguinte relação:

$$\left| \frac{\alpha - 1,3929}{\alpha_0 - 1,3929} \right|^{0,6321} \left| \frac{\alpha + 2,3929}{\alpha_0 + 2,3929} \right|^{0,3679} = \frac{\mu}{\mu_{eff}} \quad (3.31)$$

onde $\alpha_0 = 1$. Para números de Reynolds elevados ($\mu/\mu_{eff} \ll 1$), $\alpha_k = \alpha_{\varepsilon} \approx 1,393$.

Nas Eqs. (3.29) e (3.30), o termo G_k representa a geração de energia cinética turbulenta devido aos gradientes de velocidade médios, sendo avaliado por:

$$G_k = \mu_t \tilde{S}^2 \quad (3.32)$$

onde $\tilde{S}^2 = 2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}$ é o tensor taxa de deformação, definido como:

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.33)$$

O último termo da Eq. (3.29), Y_M , referente aos efeitos da compressibilidade sobre a turbulência, é avaliado segundo Sarkar e Balakrishnan (1990):

$$Y_M = 2\bar{\rho}\tilde{\varepsilon} \frac{\tilde{k}}{\gamma R T} \quad (3.34)$$

onde γ é a razão entre os calores específicos a pressão constante e a volume constante.

O último termo da Eq. (3.30), R_ε , referente à taxa de deformação do escoamento, é definido por:

$$R_\varepsilon = \frac{C_\mu \bar{\rho} \eta^3 (1 - \eta / \eta_0) \tilde{\varepsilon}^2}{1 + \beta \eta^3} \frac{1}{\tilde{k}} \quad (3.35)$$

onde $\eta = \tilde{S}k / \tilde{\varepsilon}$, $\eta_0 = 4,38$ e $\beta = 0,012$.

Vale lembrar que o modelo RNG k- ε possui um custo computacional levemente maior do que o associado ao modelo k- ε tradicional.

3.4.3 Tratamento de Parede

Escoamentos turbulentos são significativamente afetados pela presença de paredes. Perto das paredes a viscosidade ajuda a reduzir as flutuações de velocidade tangencial enquanto o bloqueio cinemático ajuda a reduzir as flutuações normais à parede. No entanto, à medida que se distancia da parede, a turbulência torna-se elevada em função da produção de energia cinética turbulenta pelo mecanismo de deformação do escoamento médio. O tratamento de parede busca modelar o efeito da presença das paredes sobre a turbulência e ao escoamento como um todo. Através de uma boa representação do escoamento na região da

parede objetiva-se assegurar resultados precisos de quantidades importantes como, por exemplo, atrito viscoso e transferência de calor junto às superfícies sólidas.

Existem dois tipos de tratamento de parede: o uso de funções parede e o uso de modelos de turbulência capazes de serem aplicados na região próxima a parede. Como o uso de modelos para a região da parede requer uma grande atenção ao refino da malha computacional junto à superfície, neste trabalho optou-se pelo uso de funções parede. A vantagem desta escolha reflete-se em uma redução do custo computacional, não somente devido à malha computacional menos refinada mas também devido à maior estabilidade numérica. Com cuidados adequados, uma acurácia razoável na previsão do escoamento pode ser obtida com o emprego dessas funções.

Neste trabalho são utilizadas as funções parede de não-equilíbrio. A vantagem desta escolha em relação às funções parede padrão se deve ao fato de poderem incluir efeitos de gradientes de pressão. Naturalmente, gradientes de pressão são características de escoamentos de interesse tecnológico, muitas vezes envolvendo regiões de separação e recolamento. A função parede de não-equilíbrio tem como base o conjunto de funções semi-emíricas, chamadas funções-parede padrão, propostas por Launder e Spalding (1974), com uma variante que leva em conta os efeitos do gradiente de pressão. A função parede de não-equilíbrio utiliza ainda um conceito baseado em duas camadas (*two-layer-based concept*) que serve para modelar o termo de produção da energia cinética turbulenta G_k e a taxa de dissipação viscosa ε , de acordo com a distância em relação à parede.

A lei logarítmica para o perfil de velocidade média, levando em conta os gradientes de pressão, é escrita como:

$$U^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^+) \quad (3.36)$$

com

$$U^+ \equiv \frac{\tilde{U} C_\mu^{1/4} k_P^{1/2}}{\tau_w / \rho} \quad (3.37)$$

$$y^+ = \frac{\rho C_\mu^{1/4} k^{1/2} y}{\mu} \quad (3.38)$$

onde κ é a constante de von Kármán com valor igual a 0,4187 e E é uma constante empírica com valor igual a 9,793. A equação para \tilde{U} é definida abaixo:

$$\tilde{U} \equiv U - \frac{1}{2} \frac{dp}{dx} \left[\frac{y_v}{\rho \kappa \sqrt{k}} \ln \left(\frac{y}{y_v} \right) + \frac{y - y_v}{\rho \kappa \sqrt{k}} + \frac{y_v^2}{\mu} \right] \quad (3.39)$$

onde y_v é a espessura física da subcamada viscosa, definida por:

$$y_v \equiv \frac{\mu y_v^+}{\rho C_\mu^{1/4} k_P^{1/2}} \quad (3.40)$$

onde a espessura adimensional da subcamada limite viscosa é assumida, por conveniência numérica, ser $y_v^+ = 11,225$.

Uma lei logarítmica para a temperatura média, em analogia ao perfil de velocidade média, pode ser escrita como:

$$T^+ \equiv \frac{(T_w - T_p) \rho c_p C_\mu^{1/4} k_P^{1/2}}{\dot{q}} = \begin{cases} Pr y^+ + \frac{1}{2} \rho Pr \frac{C_\mu^{1/4} k_P^{1/2}}{\dot{q}} U_p^2 & se \quad (y^+ < y_T^+) \\ Pr_t + \frac{1}{\kappa} \ln E y^+ + P + \\ \frac{1}{2} \rho \frac{C_\mu^{1/4} k_P^{1/2}}{\dot{q}} \{ Pr_t U_p^2 + (Pr - Pr_t) U_c^2 \} & se \quad (y^+ > y_T^+) \end{cases} \quad (3.41)$$

onde T_p é a temperatura em um volume adjacente à parede e \dot{q} e T_w são, respectivamente, o fluxo de calor e a temperatura da parede. Pr e Pr_t são, por sua vez, os números de Prandtl molecular e turbulento, respectivamente. Neste trabalho, o número de Prandtl turbulento Pr_t é assumido ser igual a 0,85. Por fim, o valor do termo P é avaliado segundo a proposta de Jayatilleke (1969):

$$P = 9,24 \left[\left(\frac{Pr}{Pr_t} \right)^{3/4} - 1 \right] \left[1 + 0,28 e^{-0,007 Pr / Pr_t} \right] \quad (3.42)$$

O valor da espessura da subcamada limite térmica y_T^+ é obtido da intersecção dos perfis linear e logarítmico de temperatura de acordo com a Eq. (3.41). Dependendo do valor

de y^+ na célula próxima a parede, ou o perfil linear ou o logarítmico é aplicado para obter a temperatura da parede T_w ou o fluxo de calor \dot{q} , dependendo do tipo de condição de contorno térmica utilizada.

A utilização de funções-parede para o transporte das espécies químicas segue uma forma análoga àquela dotada para a transferência de calor. Desta forma, a função-parede para as espécies químicas é definida por:

$$Y^+ \equiv \frac{(Y_{i,w} - Y_i)\rho c_p C_\mu^{1/4} k_P^{1/2}}{J_{i,w}} = \begin{cases} Sc y^+ & \text{se } (y^+ < y_c^+) \\ Sc_t \left[\frac{1}{\kappa} \ln(Ey^+) + P_c \right] & \text{se } (y^+ > y_c^+) \end{cases} \quad (3.43)$$

onde Y_i é a fração mássica da espécie i , Sc e Sc_t são os números de Schmidt molecular e turbulento, respectivamente, e $J_{i,w}$ é o fluxo difusivo da espécie i . Vale a pena destacar que os valores de P_c e y_c^+ são calculados de maneira similar aos valores de P e y_t^+ , com a diferença de que os números de Prandtl são substituídos pelos números de Schmidt correspondentes.

As funções de parede para o não-equilíbrio aplicam o conceito de duas camadas na obtenção dos efeitos da energia cinética turbulenta nas células adjacentes à parede, através da resolução da equação para k . As células próximas à parede são identificadas por duas camadas: uma camada subviscosa e uma camada totalmente turbulenta. A seguir são definidos alguns perfis que são utilizados no cálculo das quantidades turbulentas, dependendo da posição em questão ser menor ou maior do que a espessura da subcamada limite viscosa, y_v :

$$\tau_t = \begin{cases} 0, & \text{se } (y < y_v) \\ \tau_w, & \text{se } (y > y_v) \end{cases} \quad k = \begin{cases} \left(\frac{y}{y_v} \right)^2 k_p, & \text{se } (y < y_v) \\ k_p, & \text{se } (y > y_v) \end{cases} \quad \varepsilon = \begin{cases} \frac{2\nu k}{y^2}, & \text{se } (y < y_v) \\ \frac{k^{3/2}}{C_\ell^+ y}, & \text{se } (y > y_v) \end{cases} \quad (3.44)$$

onde $C_\ell^+ = \kappa C_\mu^{-3/4}$.

Com as expressões assim definidas, o termo ligado à produção de energia cinética turbulenta \overline{G}_k é modelado da seguinte forma:

$$\overline{G}_k \equiv \frac{1}{y_n} \int_0^{y_n} \tau_t \frac{\partial U}{\partial y} dy = \frac{1}{\kappa y_n} \frac{\tau_w^2}{\rho C_\mu^{1/4} k_P^{1/2}} \ln \left(\frac{y_n}{y_v} \right) \quad (3.45)$$

Por outro lado, a média da dissipação no volume $\bar{\varepsilon}$ é avaliada por:

$$\bar{\varepsilon} \equiv \frac{1}{y_n} \int_0^{y_n} \varepsilon dy = \frac{1}{y_n} \left[\frac{2\nu}{y_v} + \frac{k_p^{1/2}}{C_\ell^+} \ln \left(\frac{y_n}{y_v} \right) \right] k_p \quad (3.46)$$

onde $y_n = 2 y_P$ é a altura da célula.

As Eqs. (3.45) e (3.46) são essenciais para a correta previsão dos níveis da energia cinética turbulenta k e da sua dissipação ε para os volumes pertencentes às regiões do escoamento na condição de não-equilíbrio.

3.5 Modelação da Combustão (Interação Cinética Química – Turbulência)

A taxa de produção da espécie química i é fortemente não linear e depende da temperatura e concentrações locais. Porém, o modelo de RANS fornece apenas as condições médias em um certo ponto e, assim, o desenvolvimento de um modelo para a interação entre a turbulência e taxa de reação média torna-se necessário. Pode-se utilizar um exemplo (Warnatz *et al* 2001) relativamente simples para demonstrar o problema relacionado à utilização de uma condição média ao invés de uma condição local para o cálculo da taxa de produção de uma espécie química. Neste exemplo, uma reação $A + B \rightarrow$ Produtos ocorre com variação em sua temperatura, mas sem variação em suas concentrações (combustão pré-misturada), na forma de uma função de onda senoidal, como pode ilustrado na Figura 3.3:

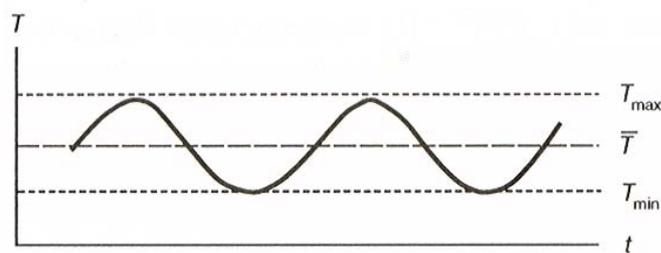


Figura 3.3 – Comportamento hipotético, no tempo, para a temperatura em uma reação

$A + B \rightarrow$ Produtos. Adaptado de Warnatz *et al.* (2001).

Neste exemplo, assume-se que a constante cinética da reação é dada por uma relação de Arrhenius na forma,

$$k_R = A \exp(-T_a/T) \quad (3.47)$$

onde T_a é a temperatura de ativação da reação (energia de ativação dividida pela constante universal dos gases) e A é um coeficiente pré-exponencial.

Como resultado da forte não-linearidade da expressão para k_R , o valor de \bar{k}_R é completamente diferente do valor de $k_R(\bar{T})$. Isto pode ser evidenciado pelo seguinte exemplo. Para uma $T_{\min} = 500K$ e $T_{\max} = 2000K$, a temperatura média obtida é de $\bar{T} = 1250K$. Se a constante cinética, para uma temperatura de ativação igual a $T_a = 50.000K$, é calculada, os resultados serão os seguintes: $k_R(T_{\max}) = 1,4 \cdot 10^{-11} A$, $k_R(T_{\min}) = 3,7 \cdot 10^{-44} A$ e $k_R(\bar{T}) = 4,3 \cdot 10^{-18} A$. Porém, após uma média no tempo do valor da constante cinética calculada para o valor instantâneo de temperatura, tem-se $\bar{k}_R = 7,0 \cdot 10^{-12} A$. Assim, pode-se notar que a utilização de uma temperatura média para o cálculo da taxa de produção da espécie química i pode fornecer valores bastante diferentes do que seriam obtidos por um modelo local (tipo DNS). Portanto, quando se utiliza modelos RANS para a solução do escoamento, há a necessidade de utilização de um modelo para a interação entre a turbulência e a taxa de reação média que leve em conta as flutuações das propriedades (e.g. temperatura) da mistura.

3.5.1 Frente de Combustão

Nos motores de combustão interna com injeção indireta e ignição por centelha, o combustível e o ar são inicialmente misturados no sistema de admissão, posteriormente induzidos para dentro do cilindro através da válvula de admissão, misturando-se com os gases residuais do ciclo anterior e, por fim, finalizando o processo de mistura no momento da compressão do cilindro (Heywood, 1988).

Em motores que utilizam combustível líquido observa-se que, ao escoar para dentro do cilindro com grandes níveis de turbulência, a mistura ar/combustível acaba carregando parcelas de combustível líquido que estavam depositadas na sede da válvula de admissão. Este combustível líquido em contato com o ambiente aquecido no interior do cilindro de um motor, em regime, evapora rapidamente e o escoamento com elevado turbilhonamento realiza a mistura até o nível molecular. No entanto, este comportamento não é verificado na situação considerada neste trabalho, visto que o combustível utilizado já se encontra no estado gasoso no momento da admissão.

Após a ocorrência da faísca sobre os reagentes pré-misturados, o núcleo de combustão (*kernel*) cresce inicialmente a uma velocidade proporcional à velocidade da chama laminar u_L .

Após atingir uma certa dimensão característica, a frente de combustão passa a ser afetada pela turbulência e continua a sua propagação com uma velocidade proporcional à velocidade de chama turbulenta u_T . É usual que o tempo característico da cinética química t_L seja menor que o tempo característico relacionado às maiores escalas de turbulência t_0 (referente à escala integral l_0). Isto caracteriza um regime de cinética rápida, ou número de Damköhler elevado $Da > 1$, resultando em uma chama fina.

Experimentos em um motor a combustão interna de 1,6 litros operando a 2000 rpm, instrumentado com janelas transparentes no cilindro que possibilitam a observação óptica da combustão (Peters, 2000), permitiram identificar as seguintes características:

- No ângulo de manivela de 40° antes do ponto morto superior ocorre a deposição da faísca.
- No ângulo de manivela de 22° antes do ponto morto superior o núcleo de combustão apresenta um crescimento de alguns milímetros e a frente de combustão caracteriza-se por uma superfície lisa característica de uma chama laminar.
- No ângulo de manivela de 14° antes do ponto morto superior as grandes escalas da turbulência afetam a superfície da chama em expansão e esta se torna enrugada.
- No ângulo de manivela referente ao ponto morto superior, a maior parte da mistura dos reagentes já realizou o processo de combustão, porém pequenas porções mais próximas às paredes do cilindro ainda restam por queimar.
- No ângulo de manivela de 40° depois do ponto morto superior toda a mistura dos reagentes já encontra-se queimada. Porém, nas regiões próximas aos anéis do cilindro não ocorre a combustão e a mistura ali depositada é em grande parte responsável pela emissão de hidrocarbonetos não queimados (HC).

Dependendo dos níveis de turbulência presentes no interior da câmara de combustão, o comportamento da chama de deflagração, oriunda da queima da mistura ar/combustível, é definido por um dos seguintes regimes clássicos de combustão turbulenta (Peters, 2000; Warnatz et al. 1999; Poinso e Veynante, 2000): regime laminar, regime de *flamelet* enrugado, regime de *flamelet* corrugado e regime de reação distribuída. Estes regimes são discutidos em detalhe no item a seguir.

3.5.2 Regimes de combustão turbulenta para reagentes pré-misturados

Esta apresentação é baseada principalmente em Poinso e Veynante (2000) e Warnatz *et al.* (2001). Um escoamento turbulento caracteriza-se pela transferência de energia das grandes escalas para as pequenas escalas. Esta transferência de energia, também conhecida como “cascata de energia”, ocorre até o momento em que a energia é dissipada completamente pelo atrito viscoso no nível das menores escalas. Este espectro contínuo, formado pelo conjunto que vai das grandes às pequenas escalas, pode ser caracterizado com o auxílio de escalas de comprimento e de tempo discretas. Para um escoamento turbulento com comportamento isotrópico e homogêneo, a energia cinética turbulenta k é definida por:

$$k = \frac{\overline{u_i' u_i'}}{2} \quad (3.48)$$

onde u_i' representa o desvio padrão da flutuação da velocidade associada à turbulência.

Na ausência de um agente que promova a turbulência, a energia cinética turbulenta pode decair a uma taxa determinada pela dissipação viscosa ε . As escalas de tempo e de comprimento que caracterizam as grandes escalas da turbulência são definidas por:

$$t_0 = \frac{k}{\varepsilon} \quad (3.49)$$

$$l_0 = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \quad (3.50)$$

Assim, o número de Reynolds turbulento pode ser definido como:

$$\text{Re}_t = \frac{k^{1/2} l_0}{\nu} = \frac{k^2}{\varepsilon \nu} \quad (3.51)$$

onde ν representa a viscosidade cinemática.

Por sua vez, as escalas de comprimento e de tempo que caracterizam as pequenas escalas (escalas de Kolmogorov) são definidas por:

$$t_K = \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (3.52)$$

$$l_K = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (3.53)$$

Para uma chama laminar em condições de reagentes perfeitamente misturados, que é característica do modelo de combustão adotado neste trabalho, as escalas de tempo, comprimento e velocidade são definidas por:

$$l_L \text{ (comprimento)}, \quad t_L \text{ (tempo)}, \quad u_L = \frac{l_L}{t_L} \text{ (velocidade)} \quad (3.54)$$

onde u_L representa a velocidade de chama laminar plana.

Assim, a partir das diversas escalas de comprimento e de tempo apresentadas pelas Eqs. (3.49) a (3.54), é possível definir os parâmetros adimensionais que caracterizam os regimes de combustão para reagentes pré-misturados. Estes parâmetros são os números de Damköhler (Da) e Karlovitz (Ka), dados por:

$$Da = \frac{t_0}{t_L} = \frac{ku_L}{\varepsilon l_L} \quad (3.55)$$

$$Ka = \frac{t_L}{t_K} = \frac{l_L \varepsilon^{1/2}}{u_L \nu^{1/2}} \quad (3.56)$$

Os números de Damköhler e Karlovitz relacionam às escalas de tempo de um processo de combustão laminar, ou seja, a escala de tempo relacionada à cinética química t_L , com as grandes t_0 e as pequenas t_K escalas de tempo, respectivamente, de um processo turbulento (note que em Karlovitz e em Damköhler a posição de t_L é diferente). Quando o número de Damköhler é alto, implica que o tempo relacionado à cinética química é menor que o tempo relacionado à turbulência, o que caracteriza um regime de chama fina, denominada de *flamelet*.

A combinação destes dois parâmetros adimensionais com o número de Reynolds turbulento fornece a seguinte relação:

$$Ka = \frac{Re_t^{1/2}}{Da} \quad (3.57)$$

Da relação acima é possível perceber que dois parâmetros são independentes e, desta forma, o diagrama que descreve os diferentes regimes de combustão para reagentes pré-misturados é apresentado na Figura 3.4.

A partir do diagrama da Figura 3.4, os seguintes regimes são identificados:

- $Re_t < 1$ – Regime de escoamento essencialmente laminar.
- $Ka < 1$ e $Re_t > 1$ – Regime de *flamelets*. Neste regime a escala de tempo da chama laminar t_L é menor do que a escala de tempo de Kolmogorov. Neste regime, a frente de chama mantém uma estrutura típica de chama laminar, mas com formato estirado e encurvado em razão da turbulência presente no escoamento. A alta velocidade com que ocorre a cinética química impede que a turbulência cause a extinção da chama laminar. O nível de intensidade turbulenta define dois limites para este regime:
 - $u' < u_L$ – A velocidade dos movimentos turbulentos é muito pequena para gerar interações chama-chama e, desta forma, a chama se propaga como uma frente única enrugada. A velocidade da chama permanece como a velocidade de chama laminar corrigida para efeitos de estiramento (*stretch*). Este regime é conhecido como regime de *flamelet* enrugado.
 - $u' > u_L$ – A velocidade dos movimentos turbulentos gera interações chama-chama que produzem pacotes ou porções de fluido de mistura queimada e não queimada que se destacam da frente de chama. A velocidade de chama local permanece a velocidade laminar corrigida para grandes efeitos de estiramento. Este regime é conhecido como regime de *flamelet* corrugado.
- $Ka > 1$, $Da > 1$ e $Re_t > 1$ – Regime de reações distribuídas. Neste regime, a escala de tempo da chama laminar possui um valor intermediário entre as menores e as maiores escalas de tempo da turbulência ($t_K < t_L < t_\theta$). Assim, as pequenas escalas de Kolmogorov podem dominar a estrutura da chama, alterando a estrutura dos *flamelets* laminares e produzindo zonas de reação distribuídas. A velocidade de chama local é maior que a velocidade de chama laminar, devido ao efeito da turbulência em alterar as taxas internas de transporte de propriedades. Pode ocorrer extinção local na frente de chama causada pela turbulência.

- $Da < 1$ e $Re_t > 1$ – Regime de reator perfeitamente misturado. Neste regime, a escala de tempo da chama laminar é maior do que as maiores escalas de tempo da turbulência ($t_L > t_0$). Assim, a turbulência proporciona uma completa mistura do fluido reagido e do fluido não reagido e a combustão é controlada completamente pela cinética química. Por isto, neste regime, a taxa média de reação se aproxima daquela calculada para um reator perfeitamente misturado.

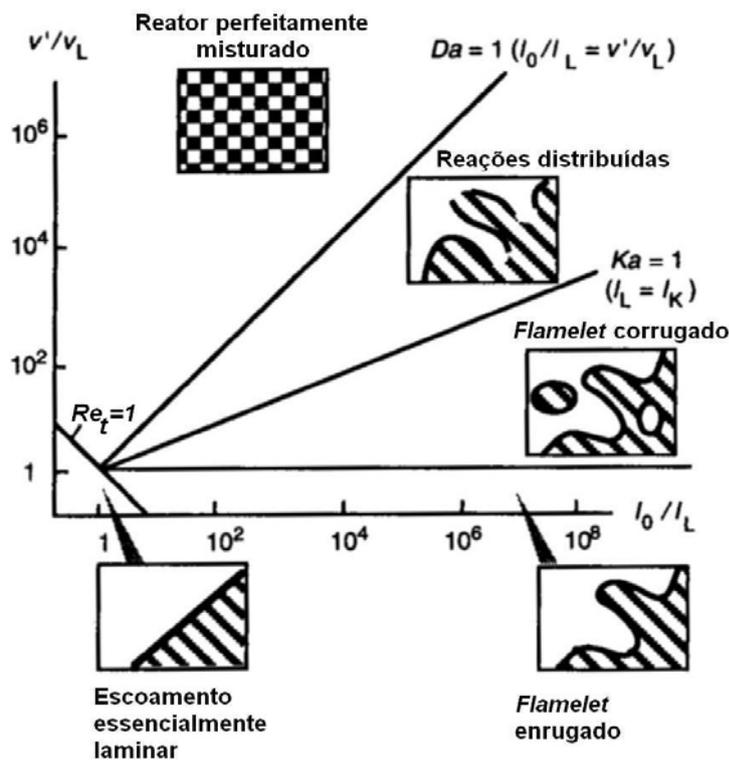


Figura 3.4 – Diagrama clássico de regimes de combustão turbulenta para reagentes pré-misturados (Diagrama de Borghi). Adaptado de Warnatz *et al.* (2001).

A Figura 3.5 apresenta a transição entre os regime de *flamelets* ($Ka < 1$ e $Re_t > 1$) – Figura 3.5 (a) – e o regime de reações distribuídas ($Ka > 1$, $Da > 1$ e $Re_t > 1$) – Figura 3.5 (c). No regime de *flamelet* na figura Figura 3.5 (a), a frente de chama essencialmente laminar queima os reagentes contidos em vórtices turbulentos da borda para o centro à medida que estes atravessam a região de chama. A velocidade de queima é maior que a velocidade de advecção da chama laminar pelos vórtices, fazendo com que a estrutura interna da chama laminar permaneça não afetada pela turbulência. A turbulência apenas causa uma deformação contínua da frente de chama. Com o aumento do número de Karlovitz, observa-se então que a espessura da região de pré-aquecimento da chama laminar cresce progressivamente à medida que ocorre a penetração de um maior número de escalas de turbulência na região de chama até atingir uma espessura equivalente à espessura média da frente de chama turbulenta. A

interação existente entre as zonas de turbulência, de reação e de pré-aquecimento da chama representam um desafio para a modelagem computacional.

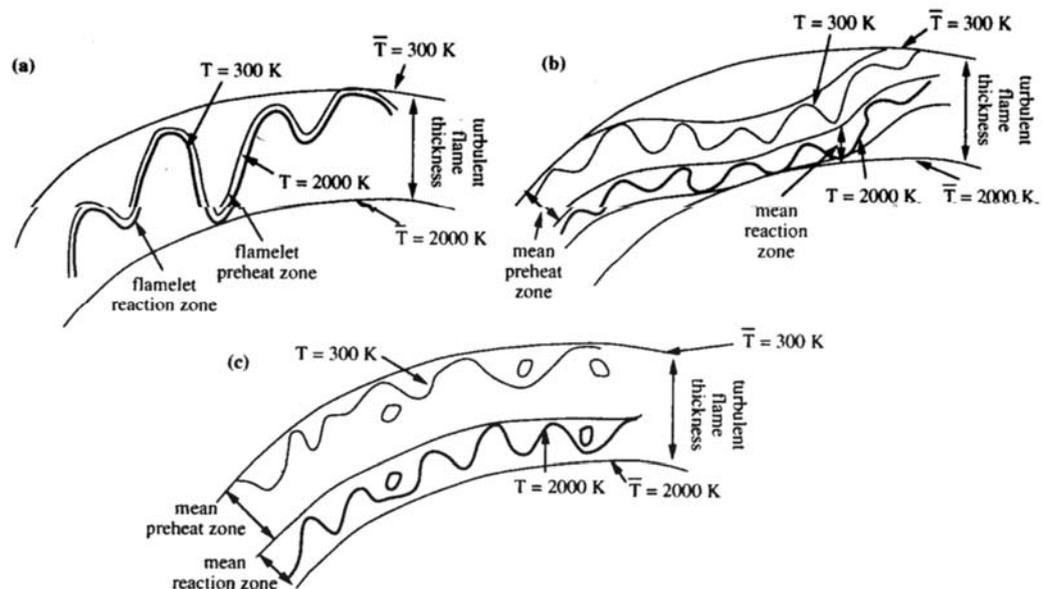


Figura 3.5 – Esquema mostrando a frente de chama na transição entre os regimes de *flamelet* e de reações distribuídas para um caso com gases não queimados e queimados a uma temperatura de 300 e 2000 K, respectivamente. Adaptado de Poinso *et al.* (2001).

3.5.3 Modelo EDC (*Eddy Dissipation Concept*)

Como o regime de combustão no motor de ignição por centelha permanece na sua maior parte em regimes de chamas finas – cinética química rápida e regime de *flamelets* – (Heywood, 1988) diferentes modelos de combustão turbulenta baseados na média das equações de transporte (modelos RANS) têm sido utilizados, como por exemplo, o modelo de Bray-Moss-Libby (BML), o modelo de chama correlacionada (*Coherent Flame Model*) e os modelos baseados em função G. Nestes modelos a taxa de combustão é controlada por transporte turbulento, através da solução do campo de variáveis médias turbulentas (temperatura, pressão e concentração locais médias de espécies químicas), e por cinética química, através da influência desta na velocidade de propagação da frente de chama.

Alguns modelos de turbulência baseados em rastreamento de frente de chama, tais como as formulações em função G (*Level Set Models*) (Peters, 2000; Tan e Reitz, 2006), utilizam a velocidade de chama turbulenta como a velocidade de deslocamento da frente de chama média. Esta velocidade de propagação é calculada com base em modelos empíricos e semi-empíricos, por exemplo, conforme revisado por Lipatnikov e Chomiak (2002). As

soluções das chamas laminares estiradas e da interação destas com os vórtices, através de DNS, têm alimentado os modelos semi-empíricos de velocidade de propagação de chamas turbulentas (Peters, 2000).

No presente trabalho adota-se o modelo EDC (*Eddy Dissipation Concept*) apresentado por Magnussen e Hjertager (1976) e Magnussen (1981, 1989). O modelo assume que, nas menores escalas de turbulência, com dimensão proporcional às escalas de dissipação da energia cinética turbulenta (escala de Kolmogorov), existe uma mistura molecular dos reagentes e dos produtos. No interior da região característica destas escalas, denominada região interna, ocorre a reação química entre os reagentes, dando origem aos produtos. Esta reação química é modelada por um mecanismo cinético como o mecanismo de uma etapa mostrado na Eq. (3.1). O modelo prevê então a existência do transporte de massa turbulento de reagentes e produtos entre o fluido contido na região interna e o fluido contido nas regiões externas às menores escalas. Por fim, o balanço de massa local requer que o fluxo líquido de massa da espécie química i entre a região interna e a região externa seja igual à taxa de reação química na região interna.

O modelo EDC foi escolhido por ser capaz de representar de forma aproximada a interação entre a velocidade de reação obtida a partir da cinética química e as taxas de transferência de massa típicas da turbulência. Este modelo tem sido utilizado em diversas aplicações, apresenta uma implementação relativamente simples e está disponível no código comercial Fluent. Em face de outras simplificações adotadas, o uso deste modelo permite avaliar as interações entre o campo de escoamento, em particular, o nível de turbulência gerado pelo escoamento de entrada no cilindro e o amortecimento proporcionado pela compressão, e a velocidade de propagação da frente de reação.

Neste modelo, a fração volumétrica ocupada pelas escalas de dissipação da energia cinética turbulenta é dada por ζ^3 , sendo ζ definido por

$$\zeta = C_{\zeta} \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{1/4} \quad (3.58)$$

onde C_{ζ} é a constante da fração volumétrica com valor igual a 2,1377 e ν é a viscosidade cinemática.

A renovação da massa contida na região característica das pequenas escalas ocorre em um tempo característico, dado pela Eq. (3.59):

$$\tau = C_\tau \left(\frac{V}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (3.59)$$

onde C_τ é a constante da escala de tempo com valor igual a 0,4082.

Escrevendo uma equação para o fluxo líquido de espécie química i entre o interior e o exterior da região delimitada pelas menores escalas, obtém-se a taxa de reação global (média no escoamento), definida pela Eq. (3.60):

$$R_i = \frac{\rho \xi^2}{\tau(1-\xi^3)} (Y_i^* - Y_i) \quad (3.60)$$

onde Y_i^* é a fração mássica da espécie química i existente no interior da região das pequenas escalas. Observa-se que, neste modelo, negligenciou-se a fração de volume de pequenas escalas que de fato reage, denotada por χ em Magnussen (1981, 1989).

O balanço de massa nas menores escalas requer que esta taxa de reação global seja proporcional à taxa de reação molecular no interior das pequenas escalas, ou seja,

$$R_i^* = \frac{R_i}{\xi^3} \quad (3.61)$$

A região das pequenas escalas pode ser modelada como um reator perfeitamente misturado (um PSR). Assumindo o mecanismo de uma etapa mostrado na Eq. (3.1), os balanços de massa e energia para as pequenas escalas resultam em:

$$\frac{\rho^*}{\tau(1-\xi^3)} (Y_i^* - Y_i) = R_i^* \quad (3.62)$$

$$\frac{\rho^*}{\tau(1-\xi^3)} (h^* - h) = q^* \quad (3.63)$$

onde ρ^* é a massa específica da mistura no interior das pequenas escalas e h^* e h são as entalpias da mistura no interior das pequenas escalas e no escoamento médio, respectivamente, definidas por:

$$h^* = \sum_1^N Y_i^* h_i^* \quad (3.64)$$

$$h = \sum_1^N Y_i h_i \quad (3.65)$$

onde N é o número de espécies químicas presentes na mistura (CH_4 , O_2 , N_2 , H_2O e CO_2).

Para a taxa de reação no mecanismo global assume-se um modelo de Arrhenius, dado por:

$$R_i^* = \frac{M_i}{n_i} \left[A T^{*\beta} \exp(-E / \bar{R} T^*) \right] X_{\text{CH}_4}^* X_{\text{O}_2}^{*2} \quad (3.66)$$

onde A é o fator pré-exponencial, E é a energia de ativação, β é um coeficiente para a temperatura, \bar{R} é a constante universal dos gases, M_i é a massa molar da espécie química i e n_i é o coeficiente estequiométrico da espécie química i na Eq. (3.1).

Assume-se comportamento de gás ideal para a mistura gasosa e assim,

$$p = \rho T R \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i}; \quad p^* = \rho^* T^* R \sum_{i=1}^N \frac{Y_i^*}{M_i} \quad (3.67)$$

$$h_i = h_{i,f}^o + \int_{T_o}^T c_{p,i} dT; \quad h_i^* = h_{i,f}^o + \int_{T_o}^{T^*} c_{p,i} dT \quad (3.68)$$

onde $c_{p,i}$ é o calor específico da espécie química i e $h_{i,f}^o$ é a entalpia de formação padrão.

O sistema formado pelas equações válidas nas escalas menores é resolvido para cada volume de controle de solução do problema, na forma de um modelo sub-malha. Desta solução, obtém-se a temperatura T^* e as concentrações Y_i^* para a região das menores escalas. De posse destes valores e dos valores locais da fração de massa local Y_i , a taxa de reação média local é obtida da Eq. (3.60).

3.6 Condições de Contorno

O problema apresenta como condições de contorno valores de pressões prescritas na entrada do sistema de admissão e na saída do sistema de exaustão. Essas pressões possuem valores absolutos de 101,32 kPa e de 102,12 kPa, respectivamente. Tanto para os sistemas de admissão como o de exaustão são assumidos valores de intensidade turbulenta iguais a 3%, para a determinação da energia cinética turbulenta k , e ainda valores de diâmetro hidráulico iguais aos diâmetros da própria geometria para a avaliação da escala de comprimento da grande escala ϵ , desta forma, para a obtenção do valor da dissipação ϵ .

A entrada do sistema de admissão possui uma condição prescrita de mistura de ar com metano a uma temperatura de 298 K. Na saída do sistema de exaustão, como uma condição localmente parabólica, prescreve-se uma mistura totalmente queimada, ou seja, apenas com a presença de vapor d'água, dióxido de carbono e nitrogênio, a uma temperatura de 523 K.

As paredes dos sistemas de admissão e exaustão, bem como o corpo da válvula são consideradas superfícies adiabáticas. Por outro lado, as paredes em contato direto com a câmara de combustão (cilindro, pistão e cabeçote), além da cabeça da válvula são consideradas superfícies a temperatura constante. Os efeitos de dois valores diferentes de temperatura (403 K e 503 K) sobre o processo de combustão foram testados e são apresentados detalhadamente no capítulo de resultados.

A ignição é aplicada como uma deposição de energia de 100 mJ, 200 mJ ou 300 mJ, dependendo da composição da mistura, durante 10^{-4} s, para diferentes ângulos de manivela. Esta deposição de energia é aplicada próxima a válvula de admissão, conforme o desenho esquemático da Figura 3.2, em uma região circular de 2,0 mm de raio.

A operação do motor é caracterizada por uma velocidade de rotação igual a 4500 rpm. A abertura e o fechamento da válvula de admissão acontece em 0 e 224°, respectivamente, e a abertura e o fechamento da válvula de exaustão em 496 e 720°, respectivamente.

A simulação de um ciclo completo inicia com o pistão no ponto morto superior (ângulo de manivela igual a zero) e termina, também, com o pistão no ponto morto superior (ângulo de manivela igual a 720°) após o motor ter descrito duas revoluções completas sobre o seu eixo. No entanto, para que este motor atinja um regime periódico de funcionamento, é necessária a simulação de 5 a 6 ciclos completos.

3.7 Composição da Mistura

Conforme a Eq. (3.1), a combustão da mistura de ar e metano é definida como uma reação de oxidação de uma molécula de metano em uma molécula de dióxido de carbono e duas moléculas de vapor d'água. Desta forma, em função da reação abordada neste trabalho ser descrita por apenas uma etapa, e com a simplificação de que ocorre a transformação completa dos reagentes nos produtos especificados, não há a presença de subprodutos da reação e nem a presença de outras espécies químicas.

A reação apresentada na Eq. (3.1) descreve a combustão de uma mistura estequiométrica de ar e metano e, assim, define a razão ar/combustível estequiométrica. As razões ar/combustível (A/C) utilizadas neste trabalho são apresentadas na Tabela 3.1 abaixo.

Tabela 3.1 – Razões de estequiometria, para a mistura ar/metano, utilizadas nas simulações.

Tipo de Mistura	λ	A/C
Estequiométrica	1,0	17,16
Pobre I	1,1	20,76
Pobre II	1,2	24,71

4.1 Introdução

Após terem sido apresentadas a formulação do problema e a modelagem matemática adotada para a resolução do problema, há a necessidade da escolha de uma metodologia para a obtenção da solução numérica do sistema de equações resultante. Neste trabalho é adotada a metodologia de volumes finitos, aplicada por meio do código comercial Fluent v.6.3.26 (2006).

O método dos volumes finitos tem como objetivo a transformação do sistema de equações diferenciais em um sistema de equações algébricas, por meio de integrações no tempo e no espaço, para cada um dos volumes finitos da malha computacional.

A resolução do sistema de equações algébricas é feita através do método de Gauss-Seidel com o auxílio de um procedimento *Multigrid* (Hutchinson e Raithby, 1986) destinado à aceleração da convergência do procedimento iterativo. As interpolações nas faces dos volumes finitos são feitas por meio dos esquemas *upwind* de segunda ordem e *power-law*. Por fim, o acoplamento pressão-velocidade é realizado através do método PISO.

Este capítulo destina-se a apresentação de detalhes das discretizações espacial e temporal das equações governantes, bem como da apresentação das funções de interpolação e do acoplamento pressão-velocidade aplicados ao sistema de equações algébricas. Além disto, o capítulo discute também a metodologia adotada para o tratamento de fronteiras móveis no domínio de solução. Por fim, são abordadas as condições iniciais do problema e alguns procedimentos específicos para a solução numérica.

4.2 Discretização Espacial e Temporal

Uma equação de conservação genérica, para o transporte de uma quantidade qualquer ϕ , em regime transiente, pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho u\phi) = \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) + S_\phi \quad (4.1)$$

onde ρ é a densidade, $\nabla \phi$ é o gradiente de ϕ , Γ_ϕ é o coeficiente de difusão para ϕ e S_ϕ é um eventual termo fonte de ϕ .

Para a discretização de acordo com a metodologia de volumes finitos, a equação Eq. (4.1) é integrada no espaço em um volume de controle, resultando em

$$\int_V \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \oint \rho\phi\vec{u} \cdot d\vec{A} = \oint \Gamma_\phi \nabla\phi \cdot d\vec{A} + \int_V S_\phi dV \quad (4.2)$$

onde \vec{u} é o vetor velocidade, \vec{A} é o vetor área e V é o volume.

A Eq. (4.2) representa o balanço líquido da propriedade ϕ em um volume finito. Os termos do lado esquerdo da igualdade representam a variação com o tempo da propriedade no volume de controle e o transporte advectivo líquido através das faces do volume de controle. Os termos do lado direito representam o transporte difusivo líquido e a geração da propriedade ϕ no volume, respectivamente. Ao serem considerados os fluxos médios nas faces do volume finito, a equação de transporte discretizada torna-se

$$V \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \sum_f \rho_f \phi_f \vec{u}_f \cdot \vec{A}_f = \sum_f \Gamma_\phi (\nabla\phi)_f \cdot \vec{A}_f + S_\phi V \quad (4.3)$$

onde o subíndice f representa a face do volume finito, $\rho_f \vec{u}_f \cdot \vec{A}_f$ representa o fluxo de massa através da face f e $(\nabla\phi)_f$ é o vetor gradiente de ϕ avaliado na face f .

Assumindo um arranjo co-localizado para a malha computacional usada para a discretização, todas as variáveis são calculadas para o centro de cada volume finito. A relação que a variável deste volume mantém com a variável dos volumes vizinhos pode ser vista ao se reescrever a equação discretizada na forma

$$a_p \phi_p = \sum a_{nb} \phi_{NB} + S_u \quad (4.4)$$

onde os subscritos nb e NB são o número de volumes vizinhos ao volume central de subscrito p e P . Os coeficientes a_p e a_{nb} , por sua vez, determinam a influência do volume em questão para o cálculo da propriedade ϕ em ϕ_p e ϕ_{NB} , respectivamente.

A Eq. (4.4) é válida somente para os volumes centrais do domínio. Para os volumes adjacentes às fronteiras do domínio, há a necessidade de uma adequação das novas condições de contorno a esta equação discretizada.

O sistema de equações discretizadas forma uma matriz que deve, então, ser resolvida para a obtenção do valor da propriedade ϕ em cada volume do domínio discreto. Este sistema de equações é resolvido pelo método de Gauss-Seidel com o auxílio do método *Multigrid*, resultando em uma aceleração da convergência do procedimento iterativo.

Como as equações governantes utilizadas neste trabalho são aplicadas para regimes transientes, há também a necessidade de uma discretização para o tempo. Essa discretização das equações é feita de modo similar à discretização no espaço, mas com os termos das equações de conservação sendo agora integrados ao longo do tempo. Esta discretização temporal, com precisão de primeira ordem e uso de uma formulação totalmente implícita para a interpolação no tempo de uma propriedade ϕ , pode ser escrita como:

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = F(\phi^{n+1}) \quad (4.5)$$

onde a função F representa a discretização espacial, apresentada anteriormente, e os sobrescritos n e $n+1$ representam os valores da propriedade ϕ para o instante de tempo atual e para o próximo instante de tempo, respectivamente. Adota-se uma precisão temporal de primeira ordem devido a uma limitação do código Fluent em usar esquemas de maior ordem de precisão na presença de malhas móveis.

4.3 Funções de Interpolação

Por definição, o arranjo de malha co-localizado avalia todas as variáveis no centro dos volumes de controle. Mesmo assim, os termos referentes aos transportes advectivo e difusivo, presentes na Eq. (4.3), necessitam que essas variáveis sejam avaliadas nas faces dos volumes de controle, através de um método de interpolação dos valores das variáveis nos centros dos volumes.

Neste trabalho são utilizados dois esquemas de interpolação: um de primeira ordem, o esquema *power-law*, e um de segunda ordem, o esquema *upwind* de segunda ordem.

O esquema *power-law* interpola o valor na face da célula, para uma quantidade ϕ , com o auxílio da solução exata de uma equação unidimensional convectiva-difusiva, dada por

$$\frac{d}{dx}(\rho u \phi) = \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) \quad (4.6)$$

onde Γ e ρu são assumidos constantes ao longo do intervalo $0 \leq x \leq L$. A forma como o valor de ϕ varia ao longo de x é dado pela integração da Eq. (4.6) aplicando condições de contorno de ϕ prescrito ($\phi = \phi_0$ em $x = 0$ e $\phi = \phi_L$ em $x = L$), resultando em:

$$\frac{\phi(x) - \phi_0}{\phi_L - \phi_0} (\rho u) = \frac{\exp\left(Pe \frac{x}{L}\right) - 1}{\exp(Pe) - 1} \quad (4.7)$$

onde $\phi_0 = \phi|_{x=0}$, $\phi_L = \phi|_{x=L}$ e Pe é o número de Peclet, dado por:

$$Pe = \frac{\rho u L}{\Gamma} \quad (4.8)$$

Desta forma, a interpolação é uma função do número de Peclet. Por exemplo, quando o escoamento é dominado pela advecção, o valor da quantidade ϕ na face f é igual ao valor da quantidade ϕ na célula a montante. Neste esquema de interpolação, por simplicidade, a difusão é considerada nula quando o número de Peclet na célula é maior do que 10.

No esquema *upwind* de segunda ordem (Barth e Jespersen, 1989), o valor da quantidade ϕ na face f do volume de controle é calculado de acordo com

$$\phi_f = \phi + \nabla \phi \cdot \vec{r} \quad (4.9)$$

onde ϕ e $\nabla \phi$ são os valores da variável e do seu gradiente no centro e na face da célula a montante, respectivamente. O vetor \vec{r} é o vetor deslocamento entre o centro da célula a montante e a face da célula. O valor de $\nabla \phi$, avaliado para cada célula, é determinado pelo teorema de Green-Gauss, aqui escrito na forma discreta como

$$\nabla \phi = \frac{1}{V} \sum_f^{N_f} \bar{\phi}_f \vec{A}_f \quad (4.10)$$

onde $\bar{\phi}_f$ é o valor na face para a média de ϕ nas duas células adjacentes à face f .

4.4 Acoplamento Pressão-Velocidade

O objetivo dos métodos de acoplamento pressão-velocidade é determinar um campo de pressão que, quando inserido nas equações da conservação da quantidade de movimento, origine um campo de velocidade que satisfaça a equação da conservação da massa.

Dentre os inúmeros métodos que realizam este acoplamento destacam-se os métodos SIMPLE, SIMPLEC e PISO. Os métodos SIMPLEC e PISO fornecem melhores taxas de convergência do que o método SIMPLE e, conseqüentemente, menores tempos de processamento computacional. Em uma comparação entre os três métodos de acoplamento pressão-velocidade, dentre eles os métodos PISO e SIMPLEC, Jang et al. (1986) mostrou que o algoritmo PISO apresentava melhor desempenho na convergência e, assim, menor custo computacional em comparação aos outros dois métodos.

O algoritmo PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*) é um procedimento para o acoplamento pressão-velocidade que foi desenvolvido, originalmente, para o cálculo não-iterativo de escoamentos transientes compressíveis. Este algoritmo pode ser visto como uma extensão do método SIMPLE, porém, com o uso de um passo a mais para a correção do campo de pressão.

Ao serem comparados os três métodos de acoplamento pressão-velocidade disponibilizados pelo código computacional Fluent, SIMPLE, SIMPLEC e PISO, verificou-se uma melhor taxa de convergência e um menor tempo de processamento computacional para o algoritmo PISO. Assim, em função dos dados da literatura e das qualidades verificadas em simulações prévias do problema em questão, optou-se pelo uso do algoritmo PISO como método para o acoplamento pressão-velocidade.

4.5 Fronteiras Móveis

O motor de combustão interna, simulado neste trabalho com o auxílio de uma geometria bidimensional axissimétrica, apresenta movimentos prescritos para o pistão e para as válvulas de admissão e de exaustão. Estes movimentos requerem que as fronteiras da geometria, bem como a malha nela contida, se adaptem de acordo com o ângulo de manivela (ou instante de tempo) em que o motor está sendo simulado. Desta forma, o pistão pode transladar do ponto morto superior até o ponto morto inferior, levando consigo os inúmeros volumes que compõe a malha da geometria. Este comportamento, análogo às válvulas de admissão e de exaustão, exige o uso de uma metodologia de malhas móveis.

Esta seção tem como objetivo apresentar as equações dos movimentos do pistão e das válvulas, bem como a metodologia de malhas móveis adotada.

4.5.1 Movimento do pistão

O movimento alternativo do pistão na direção axial é definido através da posição do pistão para um dado ângulo de manivela (Heywood, 1988):

$$z(\theta) = \frac{4V_c}{\pi B^2} + l + a - a \cos \theta - \sqrt{l^2 - a^2 \sin^2 \theta} \quad (4.11)$$

onde θ é o ângulo de manivela, V_c é o volume mínimo do cilindro, B é o diâmetro do cilindro, l é o comprimento da biela e a é o braço da manivela. O curso do pistão L é igual a duas vezes o braço de manivela a .

A geometria de um conjunto: cilindro, pistão, biela e manivela, juntamente com as suas variáveis características, descritas anteriormente, pode ser visto na Figura 4.1.

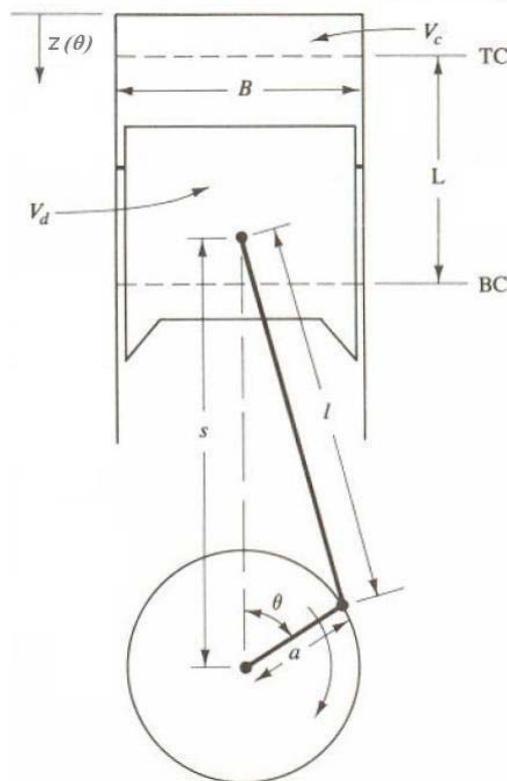


Figura 4.1 – Mecanismo de sistema biela-manivela usualmente utilizado em motores de combustão interna. Adaptado de Heywood (1988).

4.5.2 Movimento das válvulas

As válvulas de admissão e de exaustão têm os seus movimentos determinados por um polinômio de 9º grau, escrito para um afastamento máximo igual a 10 mm e um período total de abertura de válvula igual a 224º. O gráfico do polinômio que descreve os movimentos de abertura e fechamento da válvula, tanto de admissão quanto de exaustão, em função do ângulo de manivela, pode ser visto na Figura 4.2.

Por não haver sido encontrado na literatura um polinômio que descrevesse este movimento, o perfil para ambas as válvulas foi desenvolvido com base no ângulo de abertura das válvulas e no afastamento máximo. A escolha do polinômio de 9º foi adotada por possibilitar menores derivadas nos momentos de abertura e de fechamento das válvulas, tal como acontece em válvulas reais de motores a combustão interna.

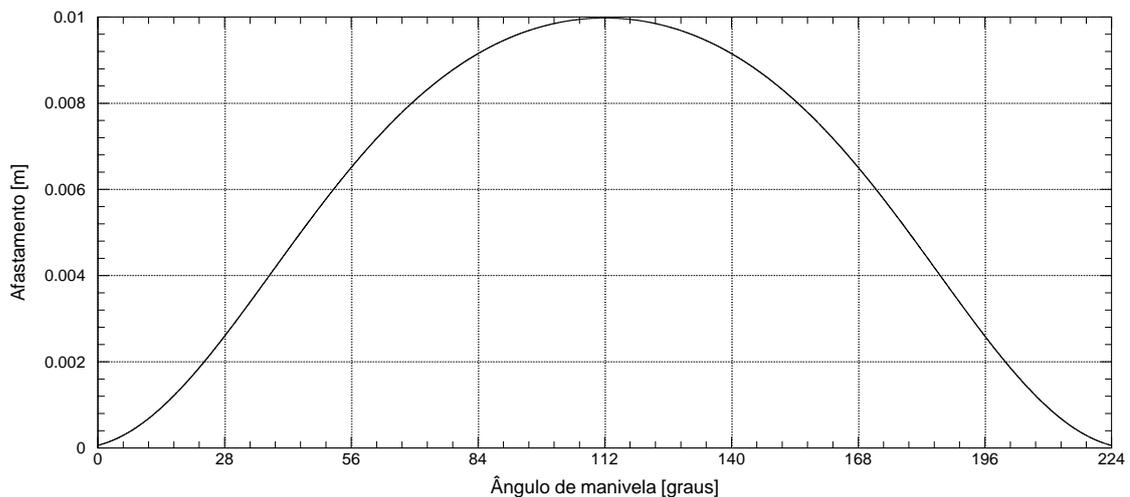


Figura 4.2 – Polinômio que descreve o movimento da válvula em função do ângulo de manivela.

4.5.3 Metodologia de malhas (ou fronteiras) móveis

O código comercial Fluent disponibiliza três diferentes metodologias para malhas (ou fronteiras) móveis. A metodologia escolhida para este trabalho é a chamada metodologia de camadas dinâmicas (*dynamic layering method*). A sua escolha deve-se à sua facilidade de uso em malhas quadrangulares em problemas bidimensionais.

Nesta metodologia, camadas de volumes vizinhos às fronteiras móveis são adicionadas ou removidas de acordo com a altura dos volumes adjacentes à esta fronteira, sendo também permitido a especificação de uma altura ideal de volume para cada superfície

móvel. Assim, de acordo com a representação esquemática apresentada pela Figura 4.3, a camada de volumes próximos à fronteira móvel (camada j) é dividida ou ligada com a camada de volumes adjacentes a ela (camada i) de acordo com a altura h dos volumes da camada j .

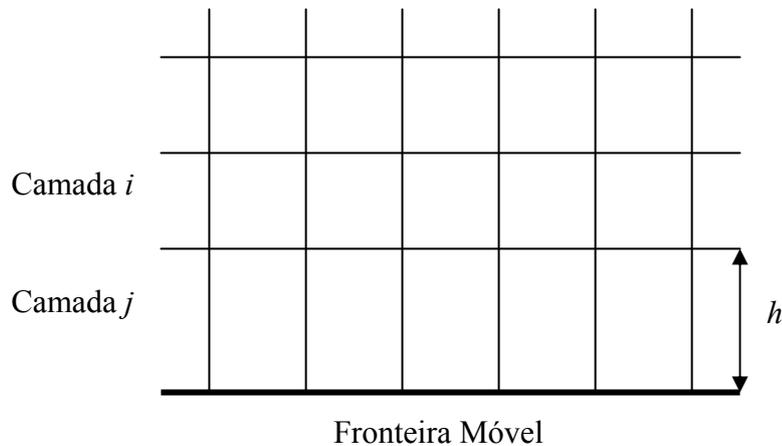


Figura 4.3 – Representação esquemática da metodologia de malhas (fronteiras) móveis

Se os volumes na camada j estiverem sendo expandidos, a segmentação destes ocorrerá quando

$$h_{\min} > (1 + \alpha_s)h_{ideal} \quad (4.12)$$

onde h_{\min} é a menor altura para o volume na camada j , h_{ideal} é a altura ideal do volume e α_s é um fator de divisão, definido como constante e igual a 0,4 para todas as malhas utilizadas neste trabalho. Quando a condição apresentada na Eq. (4.12) é atingida, os volumes são divididos de maneira que a razão entre os novos volumes seja igual a α_s em qualquer lugar sobre a fronteira móvel.

Por outro lado, se os volumes da camada j estiverem sendo comprimidos, a união deles acontecerá quando

$$h_{\min} < \alpha_c h_{ideal} \quad (4.13)$$

onde α_c é um fator de colapso, definido como constante e igual a 0,04 para todas as malhas utilizadas neste trabalho. Quando a condição apresentada na Eq. (4.13) é atingida, os volumes da camada j são fundidos aos volumes da camada i .

No entanto, se a metodologia de malhas (ou fronteiras) móveis é aplicada para camadas de volumes adjacentes a uma superfície móvel que não se estende de uma fronteira a

outra do domínio, há a necessidade de separar as regiões onde ocorrem as deformações da malha das demais regiões onde isto não ocorre. Esta condição é atingida com a criação de subdomínios, estacionários e móveis, divididos por interfaces deslizantes. A Figura 4.4 ilustra como os subdomínios são separados com o auxílio das interfaces deslizantes.

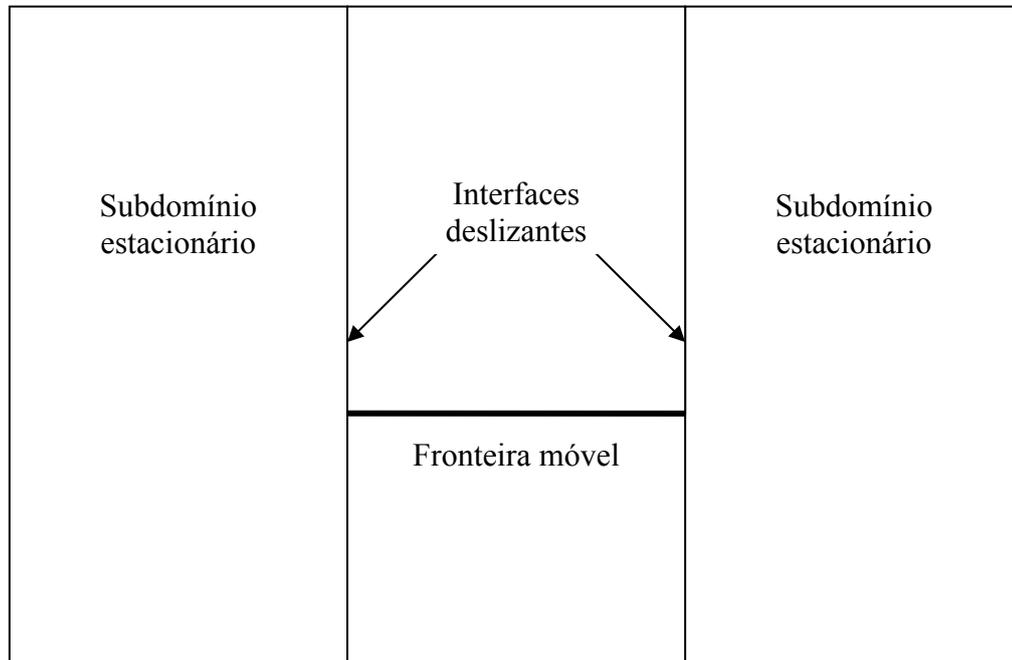


Figura 4.4 – Uso de interfaces deslizantes para subdomínios móveis e estacionários.

4.6 Condições Iniciais

As condições iniciais para cada simulação são definidas com base no comportamento final da simulação do ciclo anterior. Como para o primeiro ciclo completo de simulação não existem dados de um ciclo prévio, os campos das propriedades são definidos a partir de estimativas. Estas estimativas buscam aproximar os dados utilizados ao comportamento do motor para o instante de tempo em que o pistão encontra-se no ponto morto superior no final de um ciclo completo de funcionamento.

As magnitudes das velocidades radiais e axiais são inicializadas com valores próximos a 0,1 m/s. Os campos de energia cinética turbulenta e da taxa de dissipação turbulenta são também assumidos uniformes e com valores iguais a $0,3 \text{ m}^2/\text{s}^2$ e $0,14 \text{ m}^2/\text{s}^3$, respectivamente. Assumem-se valores manométricos de pressão iguais a 0 Pa para o sistema de admissão e de 800 Pa para o sistema de exaustão e para a câmara de combustão. Os campos de temperatura são iniciados com valores iguais a 298 K para o sistema de admissão, 523 K para o sistema de exaustão e 700 K para a câmara de combustão. Por fim, para as espécies químicas considera-

se que os valores iniciais reproduzem uma mistura queimada dentro da câmara de combustão e no sistema de exaustão, enquanto no sistema de admissão as mesmas variáveis são iniciadas com valores que reproduzem uma mistura não queimada.

Ao final da simulação do primeiro ciclo completo de funcionamento do motor são obtidos dados relativos a todas as propriedades em todas as células da geometria. Assim, o segundo ciclo é iniciado a partir desses dados. O mesmo procedimento é aplicado aos demais ciclos, tantos quanto forem necessários, até ser atingido um regime permanente de funcionamento do motor em análise.

4.7 Procedimentos de Solução

A simulação é iniciada a partir das condições iniciais apresentadas no item anterior. O passo de tempo é definido como 10^{-5} segundos e, conseqüentemente, o número de avanços no tempo é ajustado de acordo com a velocidade de rotação do motor. Como o motor é simulado para uma velocidade de rotação igual a 4500 rpm, cada ciclo possui 2667 passos de tempo. Visto que a simulação total leva de 5 a 6 ciclos para ser concluída, são necessários cerca de 16000 passos de tempo para a simulação total de um caso.

Cada passo de tempo realiza as iterações necessárias até o momento em que a convergência seja obtida. Todas as equações adotam como critério de convergência um resíduo ponderado (*scaled*) menor do que 10^{-3} , exceto para a equação da energia, cujo critério de convergência é satisfeito se o resíduo ponderado (*scaled*) for menor do que 10^{-6} . A convergência para estes critérios pode não ser alcançada em todos os passos de tempo, devido a dificuldades de convergência em alguns momentos da simulação. Nesses casos, o procedimento avança para o próximo passo de tempo quando são atingidas 100 iterações.

5.1 Introdução

Este capítulo tem como objetivo apresentar e discutir os resultados das simulações do motor de combustão interna a gás natural considerando diferentes condições de operação. Primeiramente, as características de uma condição de operação típica são apresentadas para a validação da solução numérica e para a análise dos aspectos gerais do funcionamento do motor, bem como para a análise dos aspectos locais da dinâmica dos fluidos e da combustão, a partir de dados para as variações da pressão, da temperatura, das frações mássicas e de outras variáveis de análise. Todas as variáveis são obtidas de médias espaciais no interior do cilindro. Posteriormente, apresentam-se resultados de casos simulados com a intenção de comparar diferentes aspectos de funcionamento do motor, tais como tempos de ignição, composições estequiométricas e temperaturas de parede do cilindro. Esta comparação é realizada com referência a parâmetros de performance do motor para os diferentes modelos simulados.

5.2 Análise para uma condição de operação típica

Na Tabela 5.1 apresentam-se as dimensões e características de operação do motor analisado.

Tabela 5.1 – Especificações da geometria e condições de operação gerais do motor.

Número de cilindros	1
Diâmetro do cilindro	79,5 mm
Curso do pistão	80,5 mm
Comprimento da biela	129,025 mm
Comprimento do braço de manivela	40,25 mm
Diâmetro de ambas as válvulas	30 mm
Abertura máxima para ambas as válvulas	10 mm
Razão de compressão	10:1
Ângulo de abertura da válvula de admissão	0°
Ângulo de fechamento da válvula de admissão	224°
Ângulo de abertura da válvula de descarga	496°
Ângulo de fechamento da válvula de descarga	720°
Pressão de admissão	101,32 kPa
Temperatura de admissão	298 K
Pressão de exaustão	102,12 kPa

Em todas as simulações realizadas neste trabalho, as características geométricas do motor são mantidas constantes, enquanto os efeitos das condições de operação são analisados em detalhe.

Com relação ao motor descrito na Tabela 5.1, pode-se observar que:

1. O motor é naturalmente aspirado e encontra-se operando na condição de válvula borboleta completamente aberta (*WOT – Wide Open Throttle*). Com o intuito de simular a diferença de pressão entre um leve estrangulamento na admissão e uma leve sobre-pressão na exaustão, como resultado de perdas de carga, foi admitido que a pressão de admissão situa-se praticamente igual à atmosférica e que a pressão de exaustão é levemente superior (em 980 Pa) à atmosférica.

2. A câmara de combustão possui seção transversal basicamente quadrada. Isto se configura em uma câmara de combustão com baixa razão entre área superficial de parede e volume interno, com o intuito de minimizar a transferência de calor para as paredes.

3. A abertura máxima da válvula (*lift*) foi regulada em 1/3 do valor de seu diâmetro, o que se constitui em um parâmetro tipicamente observado em outros motores.

4. A razão de compressão é uma média dos valores encontrados para motores, originalmente a gasolina ou a diesel, convertidos para o funcionamento com gás natural. Os valores encontrados na literatura variam desde 8,5:1 em Caillol *et al.* (2002), passando por 9,2:1 em Aslam *et al.* (2006) e 10,5 em Thobois *et al.* (2003), até 12:1 em Cartellieri *et al.* (1994).

5. O motor opera na ausência de cruzamento de válvula, com 44° de retardo de fechamento da válvula de admissão e 44° de avanço de abertura da válvula de exaustão.

6. O motor opera com injeção indireta de gás natural no coletor de admissão e a mistura é admitida no cilindro já perfeitamente pré-misturada com ar seco padrão, utilizando-se a composição padrão aproximada (Heywood, 1988).

7. A ignição é modelada através da liberação de 100 mJ a 300 mJ de energia térmica, dependendo da relação de equivalência, em um intervalo de tempo de 10^{-4} s.

O modelo é resolvido para as condições previamente apresentadas e, no caso base, para uma velocidade de rotação de 4.500 rpm, avanço de ignição de 48°, temperatura de parede igual a 403 K e relação de equivalência igual a 1. O valor de temperatura média de parede utilizado foi obtido com base em valores médios indicados em Heywood (1988) e em Caillol *et al.* (2002). Porém, o efeito da escolha deste valor na simulação do motor será analisado posteriormente.

5.2.1 Testes de refino de malha

O efeito do refino de malha é avaliado com o objetivo de verificar a sensibilidade da solução numérica em relação à malha utilizada. Este efeito é avaliado através da simulação de um caso específico com três diferentes malhas computacionais. O modelo é resolvido para as condições apresentadas na Tabela 5.1 e para as demais condições referenciadas antes do início desta seção. As malhas computacionais denotadas pelos números 1, 2 e 3 apresentam níveis de refino crescente. Como a simulação faz uso de uma geometria móvel, o número de volumes de cada malha varia de acordo com o ângulo de manivela do motor simulado. Assim, cada uma das malhas possui um número máximo e um número mínimo de volumes em um ciclo completo de simulação, conforme indicado na Tabela 5.2. Todas as malhas são equivalentes na maior parte dos sistemas de admissão e de exaustão, com as diferenças no refino sendo restritas apenas às regiões de passagem das válvulas de admissão e de descarga, bem como no interior do cilindro (excetuando-se as regiões próximas à parede). A Figura 5.1 apresenta um corte, para um ângulo de manivela de aproximadamente 200° , da geometria de cada uma das três malhas utilizadas na simulação.

Tabela 5.2 – Números de volumes das malhas computacionais.

	Número de Volumes	
	Mínimo (ponto morto superior)	Máximo (ponto morto inferior)
Malha 1	5.990	20.830
Malha 2	6.940	30.730
Malha 3	8.500	49.290

O refino da malha no interior do cilindro tem como objetivo verificar a dependência dos resultados numéricos para as interações (dinâmica do escoamento, combustão, etc.) que ocorrem nesta região em relação à discretização espacial.

O modelo de turbulência aqui adotado faz uso de funções-parede para avaliar as transferências de calor e de quantidade de movimento junto às superfícies sólidas. Estas funções, por sua vez, exigem uma distância adequada entre a parede e ponto nodal do volume adjacente, a fim de respeitar a condição de nível de turbulência assumido nas funções. Esta distância é referenciada através de um parâmetro adimensional y^+ ($= u^* y / \nu$), onde y é a distância até a parede, ν é a viscosidade cinemática do fluido e $u^* [= (\tau_w / \rho)^{1/2}]$ é a velocidade de fricção. Para as funções adotadas neste trabalho, os valores de y^+ devem permanecer dentro da faixa $5 < y^+ < 30$. Em função do exposto, e para garantir que os resultados numéricos não apresentem valores distorcidos e/ou não-válidos para a condição de turbulência adotada, o refino de malha

não é aplicado às regiões próximas à parede. Durante a simulação da operação do motor, a maior parte dos pontos nodais junto às paredes apresentaram valores de y^+ acima de 8.

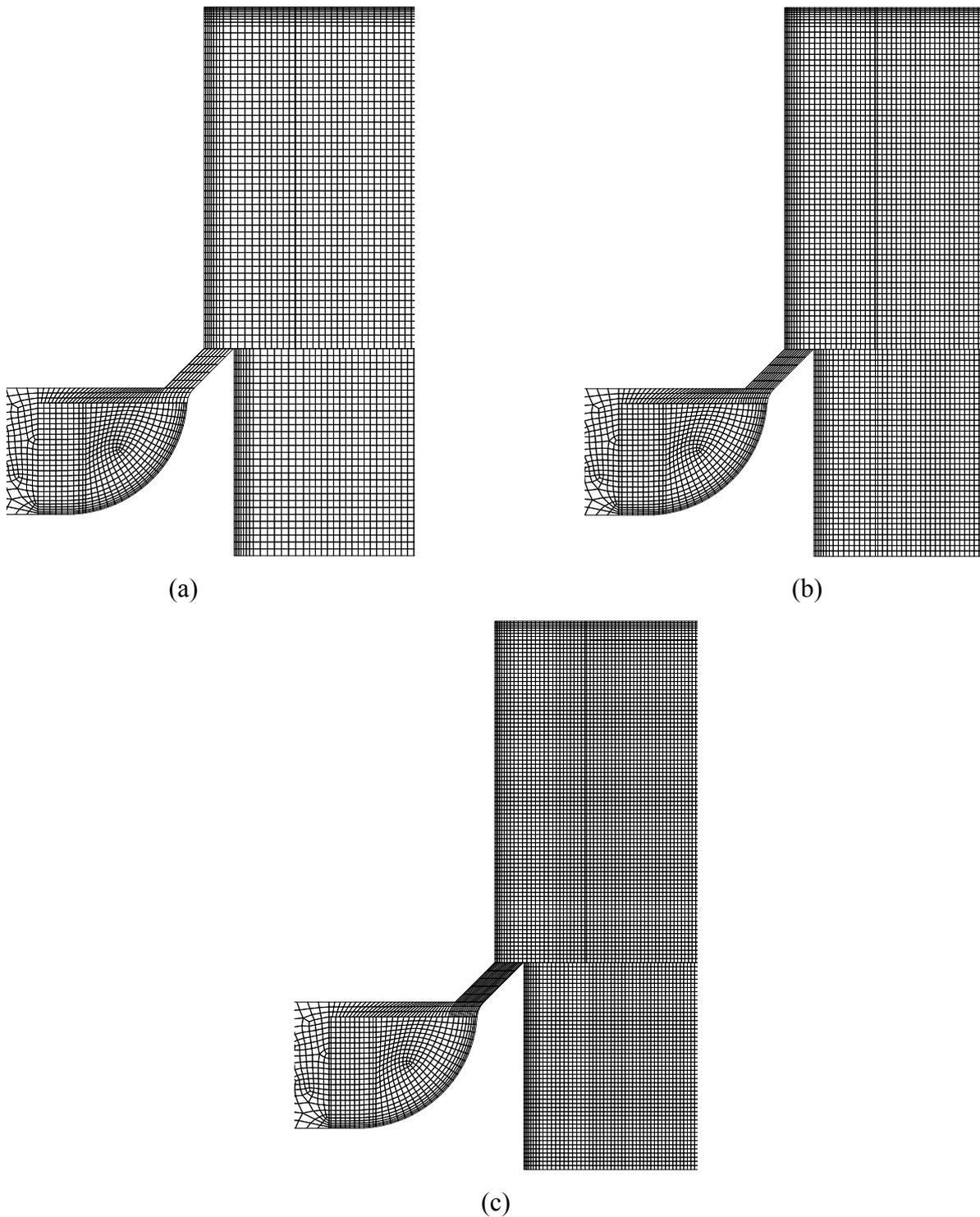


Figura 5.1 – Malhas computacionais para o ângulo de manivela de 200°: (a) malha 1, (b) malha 2 e (c) malha 3.

No entanto, o refino de malha deve garantir a correta modelagem da deposição de energia causada pela ignição e, assim, a conseqüente propagação da frente de chama ao longo

da mistura ar/combustível. Segundo informações contidas na documentação do código Fluent (2006), instabilidades são inerentes ao modelo de ignição e podem ser dependentes da malha, especialmente nas proximidades do início do evento de ignição, momento no qual o modelo reduz a difusão para simular o crescimento inicial laminar do núcleo da ignição. As instabilidades são suscetíveis, ainda, a erros numéricos que podem ser aumentados quando a malha não está alinhada com a propagação da chama (Fluent, 2006). Assim, por estas razões, a deposição de energia da ignição foi realizada junto à parede da válvula de admissão, onde a malha é refinada e de onde a frente de chama pode se propagar com um certo grau de alinhamento com a malha.

A malha do interior do cilindro é construída, para cada uma das três malhas, com base em um volume inicial fixo, junto à parede, com altura igual a 0,1 mm. A partir desse volume inicial, os demais volumes de cada uma das três malhas são gerados com base em uma taxa de crescimento de 15%, permitindo um aumento nas dimensões dos volumes à medida que estes se distanciam da parede. O maior volume no interior do cilindro para a malha 1 é limitado a uma altura igual a 0,5 mm, enquanto, para as malhas 2 e 3, as maiores dimensões são limitadas a 0,4 mm e 0,3 mm, respectivamente.

Os parâmetros globais de desempenho obtidos para o motor simulado com os três refinamentos de malha são apresentados na Tabela 5.3. Como se pode observar, os resultados para os diferentes refinamentos de malha são bem similares entre si.

Tabela 5.3 – Parâmetros de desempenho para os diferentes refinamentos de malha.

	Refino de malha		
	Malha 1	Malha 2	Malha 3
Eficiência volumétrica	0,74	0,74	0,73
Trabalho [J]	335,80	344,49	361,35
Torque [N.m]	0,47	0,48	0,50
Potência [kW]	12,59	12,92	13,55
Eficiência de conversão do combustível	0,33	0,34	0,36
Consumo específico de combustível [g/kWh]	219,12	211,83	200,63

A diferença na eficiência volumétrica para os diferentes refinamentos de malha é de menos de 1,5%. Os demais parâmetros (trabalho, torque, potência, eficiência de conversão do combustível e consumo específico) apresentam variações maiores, mas inferiores a 9,5%. Em uma análise das variações registradas de um ciclo a outro, nenhuma das malhas apresentaram variações ciclo-a-ciclo acima de 5%.

As simulações foram executadas em um PC Pentium® IV 3,6 GHz com 2 Gb de memória RAM. O avanço no tempo para a malha 1 foi determinado em 1.10^{-5} s, enquanto, para

as malhas 2 e 3, o incremento de cada passo de tempo foi de $5 \cdot 10^{-6}$ s. O número de passos de tempo necessários para a simulação de um ciclo completo para a malha 1 foi de 2667, enquanto para as malhas 2 e 3 foram necessários 5334. Em função dessas diferenças, o tempo médio de simulação para um ciclo completo variou muito de acordo com a malha utilizada. Por exemplo, para a malha 1 foram necessárias em torno de 23 horas para a simulação de um ciclo completo, ao passo que para as malhas 2 e 3 esse tempo chegou a 48 horas e 72 horas, respectivamente.

A Figura 5.2 apresenta um comparativo entre as curvas de pressão no interior do cilindro para o quinto ciclo de operação de cada um dos três refinamentos de malha. Como as curvas coincidem para os ângulos de manivela do início e do final do ciclo, os resultados são apresentados somente para os ângulos de manivela intermediários com o objetivo de evidenciar as diferenças originadas pelo emprego das diferentes malhas.

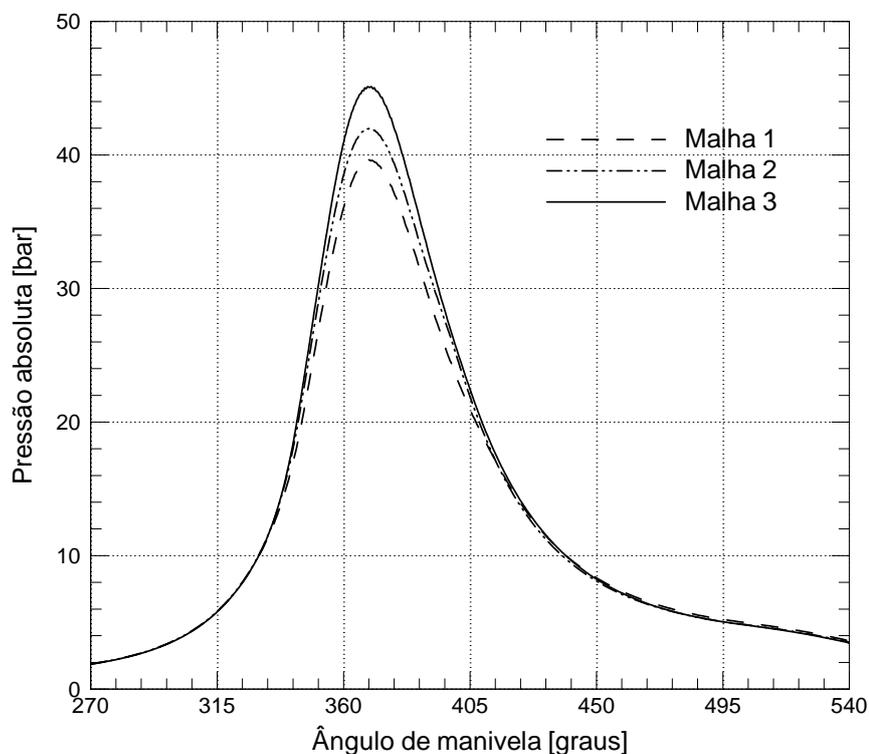


Figura 5.2 – Pressão no interior do cilindro em função do ângulo de manivela.

Verifica-se na Figura 5.2 que, mesmo suprimidos os ângulos de manivela iniciais e finais, as curvas ainda apresentam o mesmo comportamento. As diferenças se evidenciam para o intervalo que vai do ângulo de manivela igual a 340° até o ângulo igual a 460° . A maior diferença registrada para o pico de pressão foi da ordem de 5,5 bar entre as malhas 1 e 3.

5.2.2 Análise dos aspectos gerais e locais do funcionamento do motor

A análise do caso base tem como foco as curvas de pressão e temperatura no interior do cilindro, as vazões nas válvulas, as temperaturas e as velocidades nas válvulas de admissão e de exaustão em função do ângulo de manivela, além dos vetores velocidade, dos campos de temperaturas e intensidades turbulentas no interior da câmara de combustão, dentre outros. As simulações deste caso, bem como dos demais casos deste trabalho, excetuando-se os testes de refino de malha apresentados na seção anterior, foram realizadas com base na malha 1 apresentada anteriormente. Esta decisão foi tomada em função de que as diferenças observadas nos testes de malha foram pequenas, não justificando o uso da malha de maior custo computacional (malha 3).

A Figura 5.3 apresenta a pressão e a temperatura dentro do cilindro em função do ângulo de manivela.

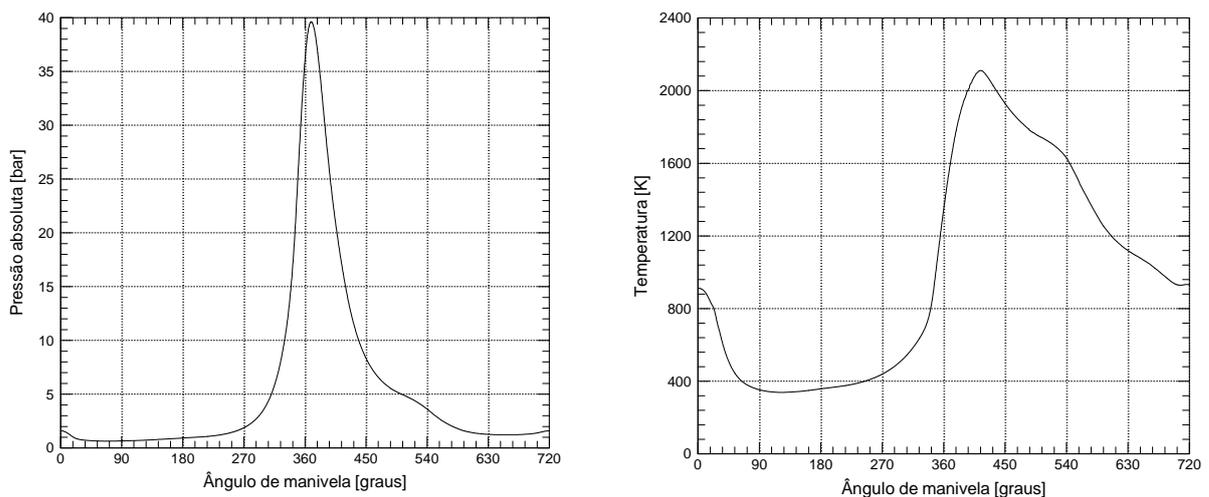


Figura 5.3 – Pressão e temperatura, respectivamente, no interior do cilindro em função do ângulo de manivela.

Como pode ser observado, a pressão e a temperatura iniciais apresentam os mesmos valores da pressão e da temperatura finais do ciclo, ou seja, como o motor é simulado em ciclos completos, as propriedades no início do ciclo refletem os valores das propriedades no final do ciclo anterior de simulação.

No início do ciclo, em 0° , a pressão de cerca de 1,5 bar, começa a diminuir para um valor um pouco abaixo de 1,0 bar, visto que neste instante a válvula de admissão inicia a sua abertura e a pressão no coletor de admissão é de 1 bar (absoluto). O mesmo comportamento é observado para a temperatura, que de um valor próximo a 900 K, que corresponde à temperatura dos gases residuais na câmara de combustão, diminui até um valor aproximado

de 300 K, ou seja, uma temperatura um pouco acima da temperatura do sistema de admissão. Nota-se que a temperatura permanece um pouco acima da temperatura de admissão em função da mistura com o gás residual remanescente no cilindro. Durante o período de admissão, a temperatura da mistura sobe devido à transferência de calor com as paredes do cilindro, que estão com uma temperatura ligeiramente maior que a temperatura de admissão. A partir do momento em que o ângulo de manivela ultrapassa o ponto morto inferior (180°), na ausência de refluxo de gás para o coletor de admissão (*backflow*), a mistura é comprimida pela diminuição do volume da câmara de combustão e, assim, ocorre uma elevação dos valores de pressão e de temperatura dentro do cilindro. Esta elevação de pressão e temperatura se intensifica após o fechamento da válvula de admissão até o momento da deposição de energia térmica pela faísca de ignição.

As curvas de pressão e de temperatura atingem seus gradientes máximos logo após a ignição, quando a mistura que se encontra comprimida dentro da câmara de combustão tem sua queima iniciada e o calor liberado pela reação eleva os níveis de temperatura e, conseqüentemente, os níveis de pressão. O pico de pressão, que ocorre logo após o ponto morto superior (360°), atinge um valor próximo a 39,6 bar, enquanto o pico de temperatura alcança um valor próximo a 2.100 K. Daí em diante, quando o cilindro inicia a sua expansão, o motor realiza trabalho e os gases queimados trocam calor com as paredes do cilindro e os níveis de pressão e temperatura começam a diminuir no interior do cilindro.

No momento em que a válvula de exaustão abre, as curvas de pressão e temperatura sofrem uma descontinuidade e existe uma forte queda de pressão no interior do cilindro. O nível relativamente elevado de pressão, no momento de abertura da válvula de exaustão, é responsável por um escoamento compressível com alta velocidade, podendo atingir condições de escoamento sônico, na região da sede da válvula de exaustão (*blowdown*). Com o escoamento através do sistema de exaustão, os valores de pressão e temperatura no interior do cilindro tendem a assumir os valores de pressão e temperatura encontrados no sistema de exaustão. Após atingir o ponto morto inferior, o movimento ascendente do pistão completa o bombeamento dos gases queimados para o sistema de exaustão (*displacement*). Isto permite que a mistura queimada seja descarregada e que, esvaziado, o cilindro esteja pronto para receber uma nova mistura ar/combustível no ciclo seguinte.

A Figura 5.4 apresenta uma comparação entre as curvas de pressão e temperatura no interior do cilindro para o motor operando em condição normal (com combustão) e para o motor na condição “motorizada” (sem combustão). A curva de pressão para o caso “motorizado” apresenta o comportamento esperado, apresentando similaridade com a curva de pressão para o caso com combustão até o instante de ignição, bem como apresentando o

comportamento de compressão e expansão dos gases esperado para um motor que trabalha sob a forma típica de um compressor. O mesmo comportamento pode ser verificado para a curva de temperatura, apresentando menores níveis em relação ao caso com combustão, para o ciclo completo do motor. Os menores níveis de temperatura no instante inicial de admissão se devem à ausência de gases residuais do ciclo anterior, visto que, para o caso “motorizado”, o motor não realiza a combustão.

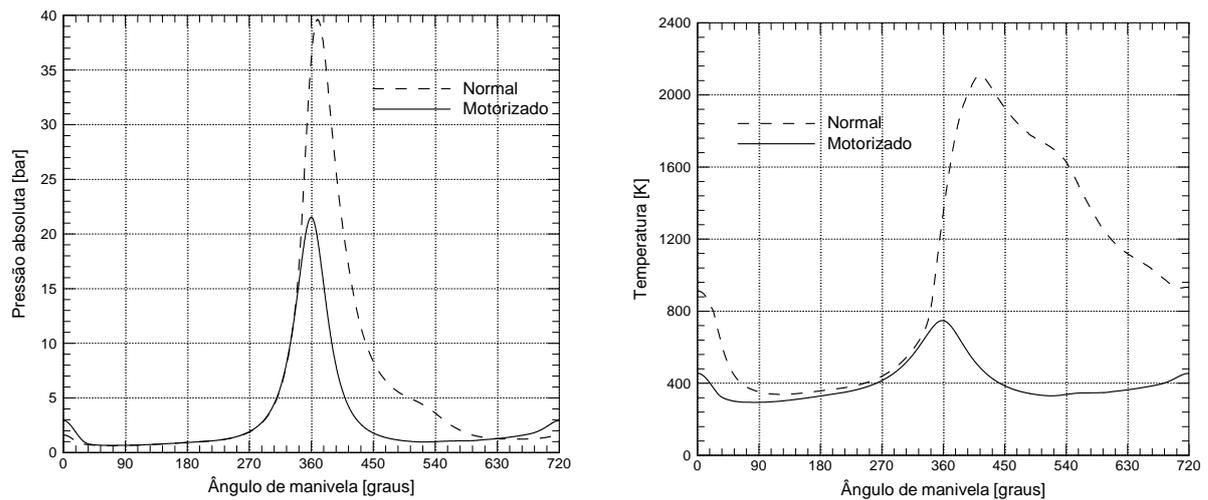


Figura 5.4 – Pressão e temperatura, respectivamente, no interior do cilindro para um motor “motorizado” em função do ângulo de manivela.

A Figura 5.5 apresenta os valores de fluxo de massa nas válvulas de admissão e de exaustão em função do ângulo de manivela do motor. Da figura, é possível observar que o maior fluxo de massa na válvula de admissão ocorre próximo do ângulo de manivela igual a 110° , ou seja, a posição em que a válvula atinge sua abertura (*lift*) máxima. Entretanto, o mesmo não ocorre com a válvula de exaustão, que apresenta o maior fluxo próximo do ângulo de manivela igual a 540° , ao invés de apresentá-lo na posição de maior abertura. Este fenômeno pode ser explicado pelos níveis elevados de pressão dentro do cilindro no instante em que a válvula de exaustão inicia a sua abertura e pelos níveis de pressão no sistema de exaustão, o que cria uma diferença de pressão suficientemente grande para expulsar os gases queimados para fora do cilindro. Assim, o processo de exaustão é caracterizado por uma região de exaustão induzida pela alta diferença de pressão entre a pressão no interior do cilindro remanescente da combustão e a pressão no conduto de exaustão (*blowdown*) seguida por uma região de exaustão induzida pela pressão gerada pelo movimento ascendente do pistão (*displacement*).

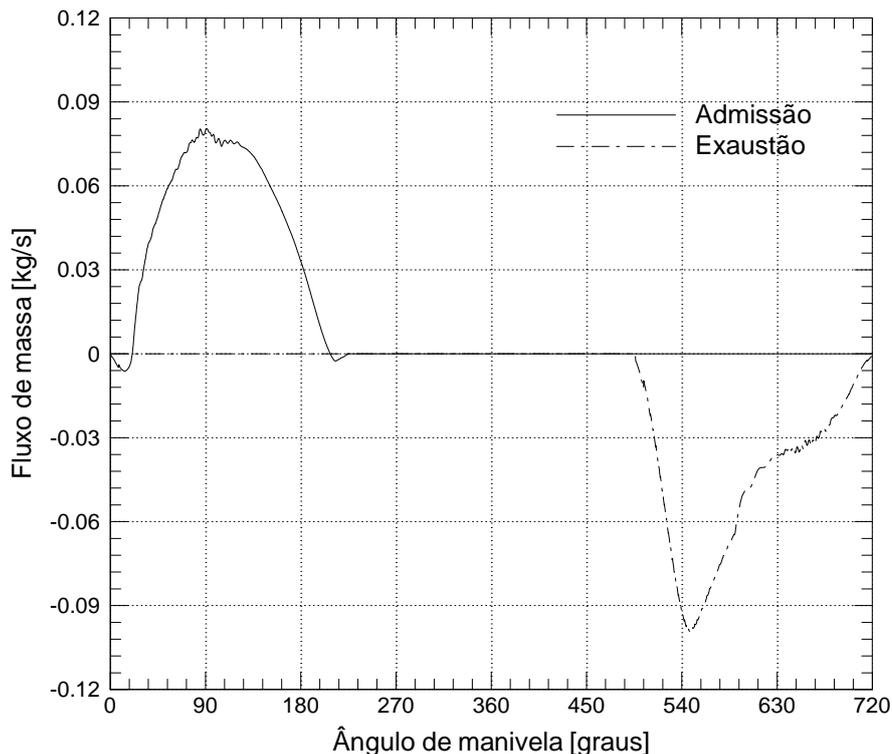


Figura 5.5 – Fluxos de massa nas válvulas de admissão e de exaustão em função do ângulo de manivela.

Uma característica observada é a condição de refluxo que acontece na válvula de admissão no momento de sua abertura. Este fenômeno acontece em função da pressão dos gases residuais na câmara de combustão atingir o equilíbrio com a pressão de exaustão, que é ligeiramente superior à de admissão. Por sua vez, um pequeno refluxo que acontece no momento de fechamento da válvula de admissão é resultado da diminuição do volume da câmara de combustão, visto que há atraso no fechamento da válvula, que acaba por expulsar uma pequena parcela da massa que havia entrado no cilindro durante toda a admissão da mistura ar/combustível.

O fluxo na válvula de exaustão apresenta uma inflexão para o ângulo de manivela próximo dos 610°. Neste momento, o fluxo da mistura queimada de gases descarregada para o sistema de exaustão, que estava anteriormente ocorrendo como resultado da diferença de pressão remanescente da combustão no interior do cilindro, passa a ser controlada pela pressão decorrente da redução do volume da câmara de combustão com o movimento ascendente do pistão. Ou seja, passa-se de um regime controlado pelo *blowdown* para um regime controlado pelo *displacement* (Heywood, 1988).

A Figura 5.6 apresenta a temperatura dos gases na seção de saída da válvula de exaustão em função do ângulo de manivela. O local exato da medição na seção de saída da válvula de exaustão é identificado na Figura 5.7. No momento de abertura da válvula de

exaustão, os gases queimados do ciclo atual misturam-se aos gases queimados no ciclo anterior, ou seja, misturam-se aos gases remanescentes no início do sistema de exaustão, fazendo com que a temperatura na abertura de admissão cresça de cerca de 520 K (gases remanescentes) para um valor aproximado de 1400 K (gases remanescentes misturados aos gases queimados no ciclo atual). A temperatura dos gases de exaustão apresenta logo em seguida uma queda em virtude da transição entre os fenômenos de *blowdown* e de *displacement* causado pelo pistão, pois ocorre uma inflexão no fluxo de exaustão dos gases e um aumento no fluxo de calor para a válvula de exaustão.

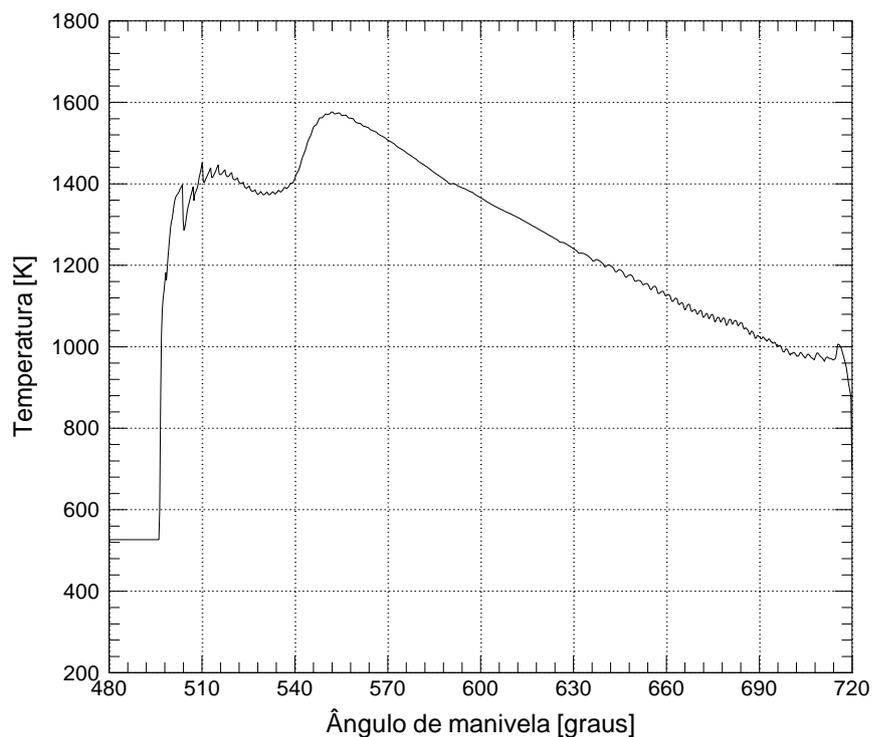


Figura 5.6 – Temperatura dos gases na seção de saída da válvula de exaustão em função do ângulo de manivela.

A partir do ângulo de manivela igual a 540°, quando é iniciado o movimento ascendente do pistão e a conseqüente diminuição da câmara de combustão, a mistura queimada é comprimida e, como o calor não consegue ser totalmente dissipado para as paredes da câmara de combustão, ocorre um pequeno aumento da temperatura no interior do cilindro (Figura 5.3), como também um aumento da temperatura dos gases na passagem pela válvula de exaustão (Figura 5.6). Logo após este instante, como os níveis de pressão no interior do cilindro já encontram-se próximos dos valores do sistema de exaustão e continua a ocorrer a transferência de calor para as paredes em contato com o gás no interior da câmara de combustão, a temperatura dos gases na passagem da válvula de exaustão diminui

gradativamente até atingir um valor aproximado de 1000 K, que coincide com a temperatura no interior do cilindro para o instante final deste ciclo.

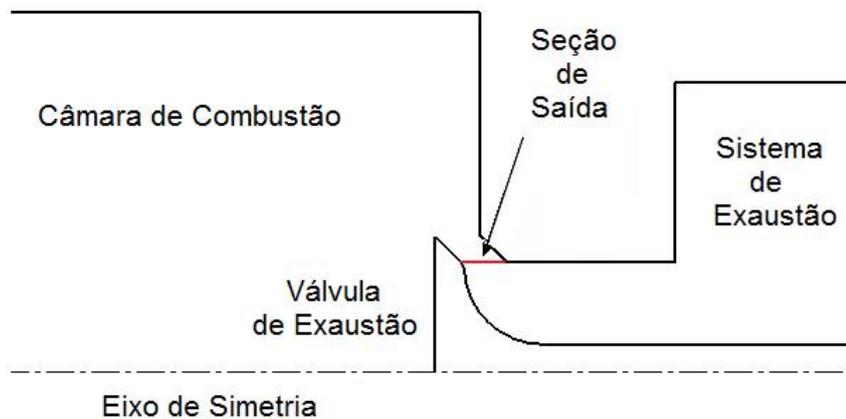


Figura 5.7 – Seção de saída da válvula de exaustão.

A Figura 5.8 apresenta a variação do número de Mach, calculado com base no módulo da velocidade média da mistura na seção de saída da válvula de admissão, em função do ângulo de manivela. Naturalmente, o número de Mach varia em função da área de passagem e do fluxo de massa da válvula.

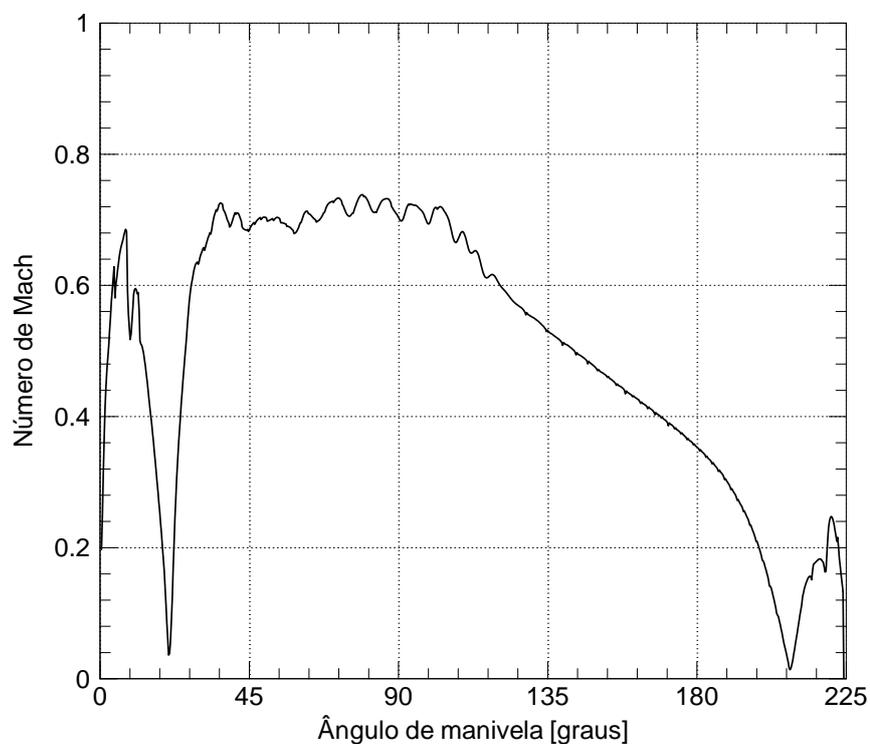


Figura 5.8 – Número de Mach em função do ângulo de manivela.

Logo no início da abertura da válvula, a massa residual do final do ciclo anterior sai do cilindro, visto que a pressão no interior do cilindro é maior do que no sistema de admissão, conforme discutido anteriormente. Em função disto e da pequena área de passagem da válvula, o número de Mach apresenta um valor próximo a 0,7, mas decaindo então bruscamente até um valor praticamente nulo quando não há fluxo líquido de massa na válvula, devido à equalização de pressão entre o sistema de admissão e o interior do cilindro. Após este instante, o número de Mach volta a crescer, pois a expansão provocada pelo movimento descendente do pistão cria um campo de pressão favorável à admissão da mistura ar/combustível e ao conseqüente aumento no fluxo desta mistura. O número de Mach permanece estabilizado até o ângulo de manivela de 115° , quando, então, a válvula de admissão inicia o seu movimento de fechamento. Com a diminuição do fluxo de admissão ocorre a diminuição do número de Mach. Por volta do ângulo de manivela de 210° , volta a ocorrer o mesmo comportamento de escoamento de retorno registrado no início da abertura da válvula de admissão. O movimento ascendente do pistão acaba expulsando parte da mistura admitida pelo cilindro e, assim, com a inversão da direção do fluxo de massa, o número de Mach cai a zero, voltando finalmente a níveis próximos a 0,2, em função da pequena área de passagem apresentada pela válvula de admissão no momento do seu completo fechamento. Observa-se, dos resultados, que os efeitos de compressibilidade são significativos para a maior parte do escoamento na região da abertura da válvula de admissão.

A Figura 5.9 apresenta a pressão e a temperatura dos gases na seção transversal da válvula de admissão em função do ângulo de manivela.

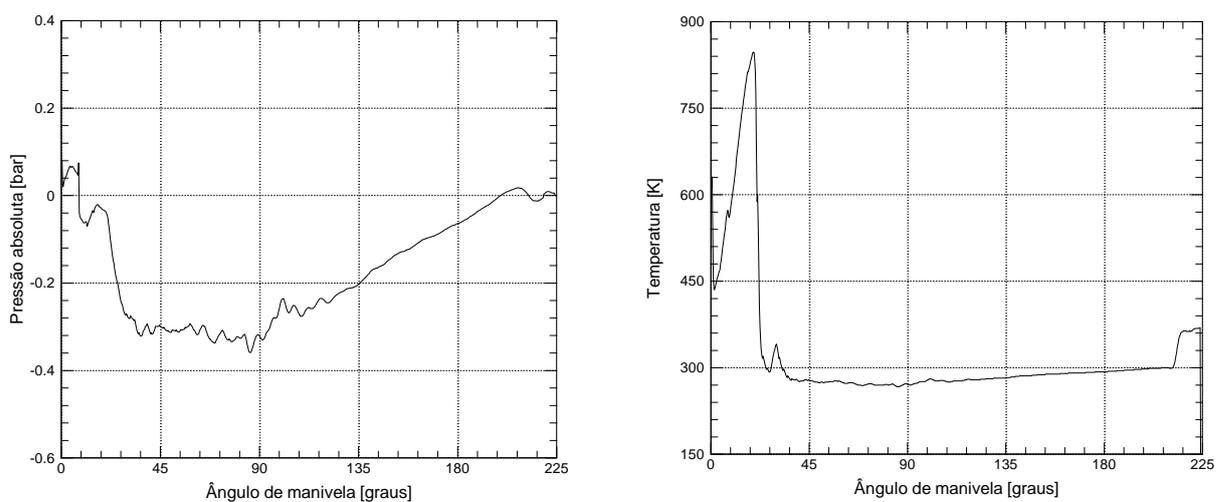


Figura 5.9 – Pressão e temperatura dos gases na área da abertura da válvula de admissão em função do ângulo de manivela.

Como o número de Mach varia em função do fluxo de massa na válvula, a pressão e a temperatura na área de abertura da válvula servem como propriedades que caracterizam este fluxo de massa. A pressão na área de passagem da válvula varia muito pouco, apresentando níveis de variação da ordem de 0,5 bar. Por sua vez, a temperatura apresenta uma maior variação nos instantes iniciais da abertura da válvula, mais precisamente no período de 0° a 25° . Este fenômeno, conforme visto anteriormente, acontece em função da pressão dos gases residuais na câmara de combustão entrar em equilíbrio com a pressão na exaustão, que é ligeiramente superior à de admissão, provocando o refluxo de gases residuais da câmara de combustão, e o aumento da temperatura dos gases na área de passagem da válvula. No restante da admissão a temperatura dos gases permanece praticamente constante.

A Figura 5.10 apresenta a razão entre a massa de oxigênio e a massa de metano que é admitida pelo cilindro através da válvula de admissão em função do ângulo de manivela. Neste caso, a mistura estequiométrica ar/combustível é formada, em fração mássica, por 0,22026 de O_2 e por 0,05507 de CH_4 . Desta forma, a razão de admissão de O_2/CH_4 deveria ser igual a aproximadamente 4,0.

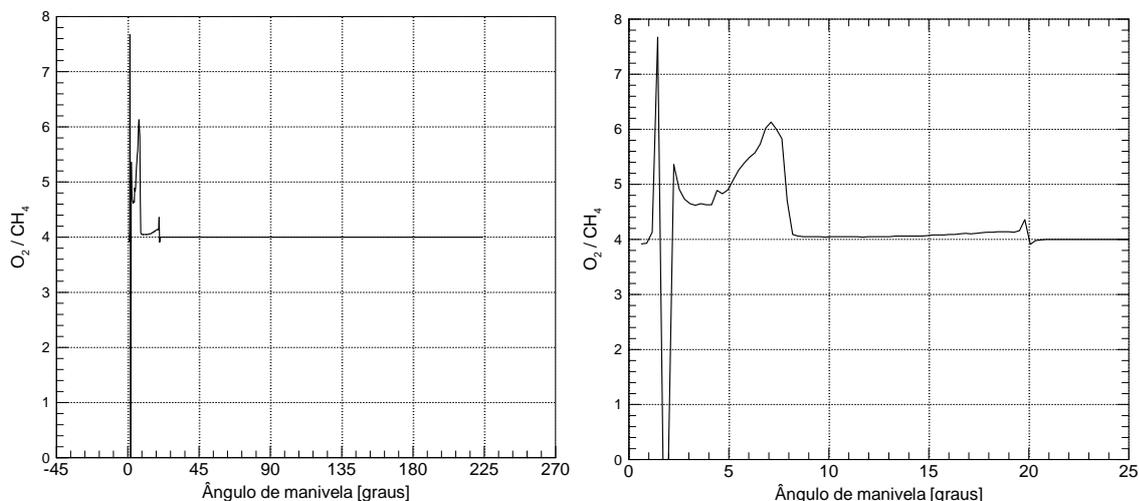


Figura 5.10 – Razão de admissão O_2/CH_4 em função do ângulo de manivela: (a) entre os ângulos de manivela de -45° a 270° e (b) entre os ângulos de manivela de 0° a 25° .

Através da Figura 5.10 verifica-se que esta razão flutua até o ângulo de manivela igual a 20° . Este período de operação coincide com o refluxo que acontece na válvula de admissão no momento de sua abertura, conforme verificado anteriormente através da análise da Figura 5.5. Nesses instantes, uma parte dos gases residuais do ciclo anterior sai do cilindro pela válvula de admissão e, assim, mistura-se com os gases na composição estequiométrica, e,

então, são admitidos. Este efeito não deve ser confundido com o mecanismo de EGR (*exhaust gas recirculation*) interno, visto que neste motor não há cruzamento de válvulas.

No entanto, verifica-se que para ângulos de manivela superiores a 20° , a proporção estequiométrica da mistura ar/combustível adquire o seu valor correto e assim permanece até o fechamento da válvula de admissão no ângulo de manivela igual a 224° . Até mesmo o pequeno refluxo próximo ao fechamento da válvula possui razão oxigênio/metano igual a 4, indicando que o escoamento de admissão exerce um efeito de *scavenging*, ou seja, empurra a fração residual para regiões afastadas na câmara de combustão.

A Figura 5.11 apresenta a fração mássica de oxigênio e de dióxido de carbono em função do ângulo de manivela.

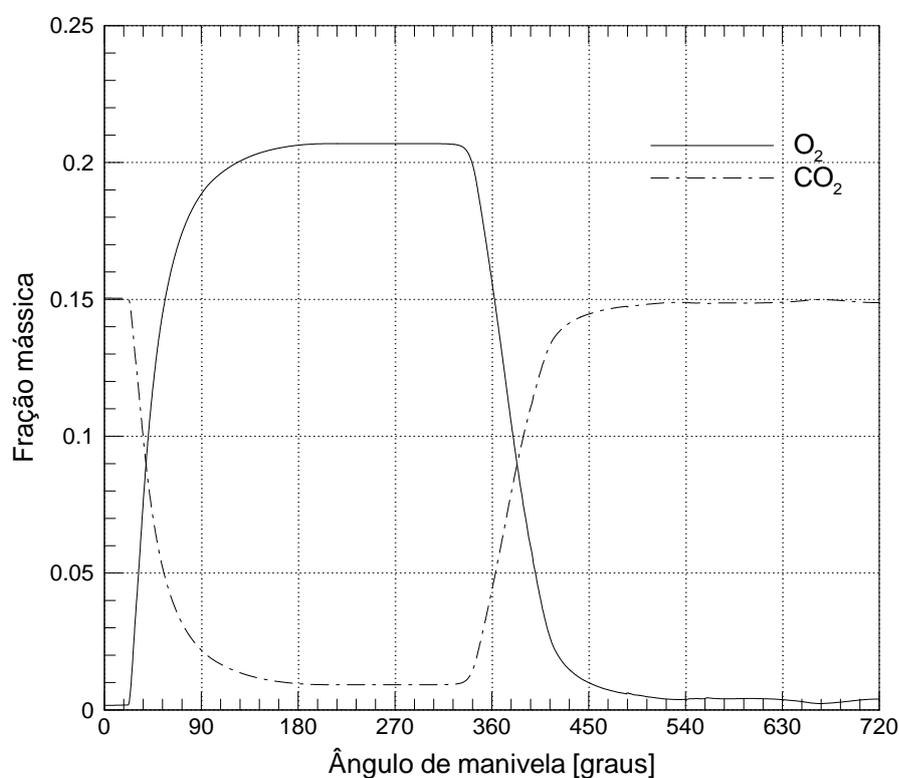


Figura 5.11 – Fração mássica para o O₂ e o CO₂ em função do ângulo de manivela.

Verifica-se que no início do ciclo as concentrações de oxigênio e dióxido de carbono crescem e diminuem, respectivamente. Como resultado da admissão da mistura ar/combustível para dentro do cilindro, a concentração de dióxido de carbono característica dos gases residuais do ciclo anterior é diluída pelo ar admitido. A concentração de oxigênio aumenta até o fechamento da válvula de admissão, e esta é a concentração que existirá no início da combustão. Então, a partir de 320° , as concentrações de gases começam a mudar em função da reação de combustão que ocorre dentro do cilindro. Nota-se que a taxa de

conversão média global de combustível pode ser obtida a partir da variação com o tempo da fração mássica de oxigênio, da pressão e da temperatura, como pode ser observado pela seguinte equação:

$$\frac{dm_{comb}}{dt} = \frac{1}{\nu} \rho V_t \left[\frac{dy_o}{dt} + y_o \left(\frac{1}{V_t} \frac{dV_t}{dt} - \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} + \frac{1}{p} \frac{dp}{dt} \right) \right] \quad (5.1)$$

onde m_{comb} é a massa de combustível, ν é a viscosidade cinemática, V_t é o volume total da câmara de combustão e y_o é a fração mássica de oxigênio.

De acordo com a Figura 5.11, a duração total da conversão do combustível ocorre entre os ângulos de manivela de 312° a 420°, o que significa que o ângulo total de queima é igual a 108°. Este ângulo total de queima corresponde ao intervalo do início da ignição até o final do processo de propagação da chama, arbitrariamente estipulado como o ângulo de manivela no qual se atinge 90% de conversão da massa inicial de combustível. Após 520°, ambas as frações mássicas apresentam valores constantes até o final do ciclo. Estes valores constantes confirmam o fim do processo de combustão. Observa-se que o modelo aqui adotado não leva em consideração fontes adicionais de hidrocarbonetos, como as parcelas decorrentes das cavidades no interior da câmara de combustão (crevices), adsorvida no filme de óleo, etc.

Admitindo que a frente de combustão seja fina, uma característica que será explorada mais tarde, pode-se estudar as características da fração de gases não queimados a montante da frente de combustão, e da fração de gases queimados a jusante da frente de combustão. Esta divisão da mistura na câmara de combustão em fração queimada e fração não queimada é típica de modelos zero-dimensionais aplicados a motores a combustão interna de ignição por centelha (Heywood, 1988). O uso de um modelo numérico capaz de detalhar localmente o fenômeno permite que essas características sejam avaliadas.

A Figura 5.12 mostra a variação com o ângulo de manivela da temperatura da fração de mistura queimada. A temperatura dos gases queimados é obtida da média mássica dos volumes da malha computacional que possuem uma fração mássica de metano abaixo de 0,0055, ou seja, 10% da fração mássica de metano na mistura estequiométrica ar/combustível.

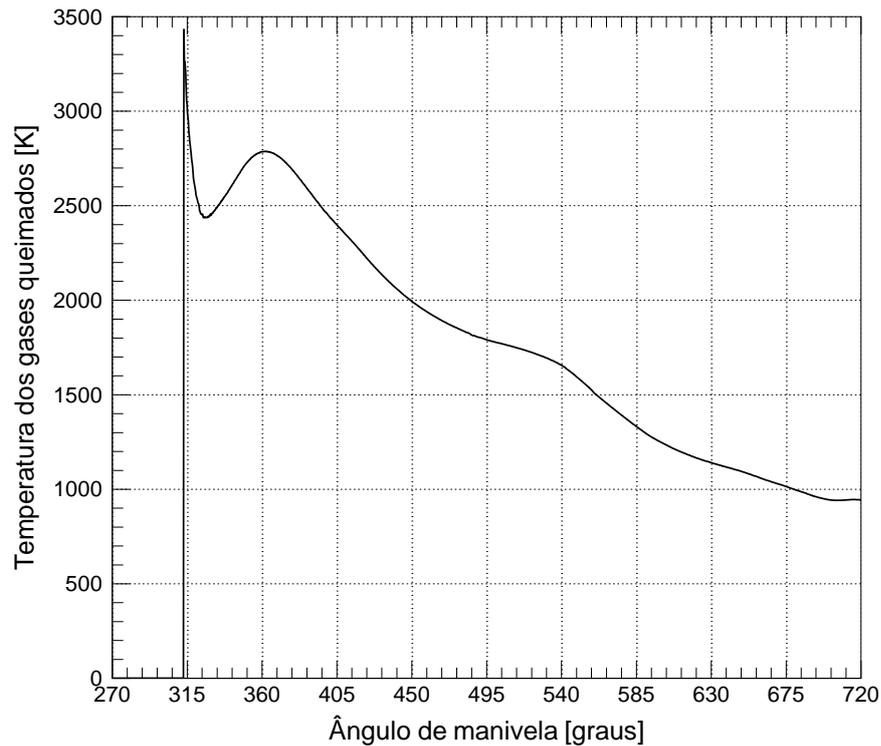


Figura 5.12 – Temperatura dos gases queimados em função do ângulo de manivela.

Verifica-se que a temperatura dos gases queimados inicia-se à temperatura do pacote de mistura que recebe a deposição da energia da ignição. A energia utilizada para a vela (100 mJ) é depositada no volume do núcleo de ignição com diâmetro de 2 mm. Assumindo que no tempo de deposição de energia (10^{-4} s) o núcleo permanece adiabático, que o calor específico médio dos gases no núcleo é de 1.170 J/kg.K e que a temperatura inicial da mistura é de 500 K, este núcleo atinge uma temperatura da ordem de 3.500 K. Ou seja, um valor de temperatura correspondente ao pico de temperatura observado na Figura 5.12. Logo após este momento, a temperatura diminui por dois efeitos. O primeiro se deve à condução de calor na fase gasosa do núcleo de ignição para os gases que o circundam. A condução de calor molecular é aumentada pela turbulência da mistura e, do ponto de vista de modelagem, existem limitações da aplicação de modelos RANS para regiões pequenas da ordem do núcleo de ignição. O segundo efeito é a diluição dos gases no núcleo de ignição pela mistura queimada na propagação da combustão para as regiões vizinhas ao núcleo de ignição. A temperatura de chama adiabática para uma mistura estequiométrica, formando produtos saturados de combustão, na pressão e temperatura onde inicia-se a combustão (7 atm e 500 K), para uma deflagração à pressão constante, é 2474 K. Nota-se que a queda inicial da temperatura dos gases queimados aproxima-se deste valor. A seguir, esta temperatura volta a subir à medida que o volume do cilindro diminui e, então, com o aumento da pressão no

cilindro, ocorre um aumento da temperatura de combustão. Por fim, após o ângulo de manivela relativo ao ponto morto superior, a temperatura volta a cair em função da expansão dos gases no interior do cilindro e da transferência de calor dos gases queimados para as paredes do cilindro.

A Figura 5.13 apresenta os fluxos de calor dos gases para as paredes em contato com a câmara de combustão, ou seja, as paredes do cabeçote, do cilindro, do pistão e das válvulas de admissão e de descarga.

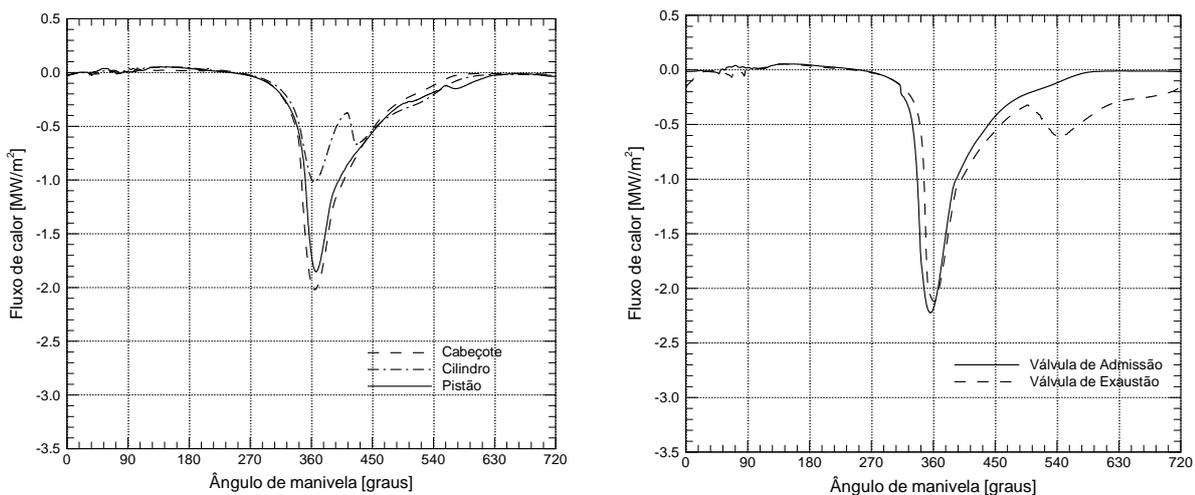


Figura 5.13 – Fluxo de calor dos gases para as paredes em contato com a câmara de combustão.

Verifica-se que a ordem de magnitude desta troca de calor aproxima-se dos $2,2 \text{ MW/m}^2$, porém por um período de tempo da ordem de apenas 10^{-4} segundos. O maior fluxo de calor ocorre nas válvulas de admissão e de descarga em função de ambas estarem localizadas na região central do cilindro e próximas do local de deposição de energia de ignição. Vale destacar uma descontinuidade no fluxo de calor na válvula de exaustão no ângulo de manivela próximo a 500° . Conforme visto anteriormente, este é o momento de abertura da válvula de exaustão que permite que os gases queimados deixem o interior da câmara de combustão. Assim, o escoamento dos gases para fora do cilindro causa um aumento da transferência de calor para a válvula de exaustão. Segundo Heywood (1988), picos de fluxo de calor para o cabeçote (válvulas) entre $1,5$ e $3,0 \text{ MW/m}^2$ foram verificados em motores operando sob condições normais de rotação e carregamento.

O fluxo de calor para o pistão apresenta níveis próximos a 1 MW/m^2 e os picos de fluxo de calor acontecem no momento em que o pistão encontra-se no ponto morto superior e cerca de 60° após o início da expansão na câmara de combustão. Os dois picos de pressão

coincidem com o contato da frente de combustão com a superfície do pistão. No primeiro pico, o contato da frente de combustão é fruto do pequeno volume da câmara associado à frente de combustão do kernel da ignição. No segundo pico, o contato da frente de combustão é fruto do final do processo de queima da mistura ar/combustível.

A Figura 5.14 apresenta o diagrama pressão-volume para o caso base. Através desta figura é possível analisar os trabalhos realizados sobre e pelo motor e, juntamente com outras características obtidas, apresentar os parâmetros globais de desempenho do motor.

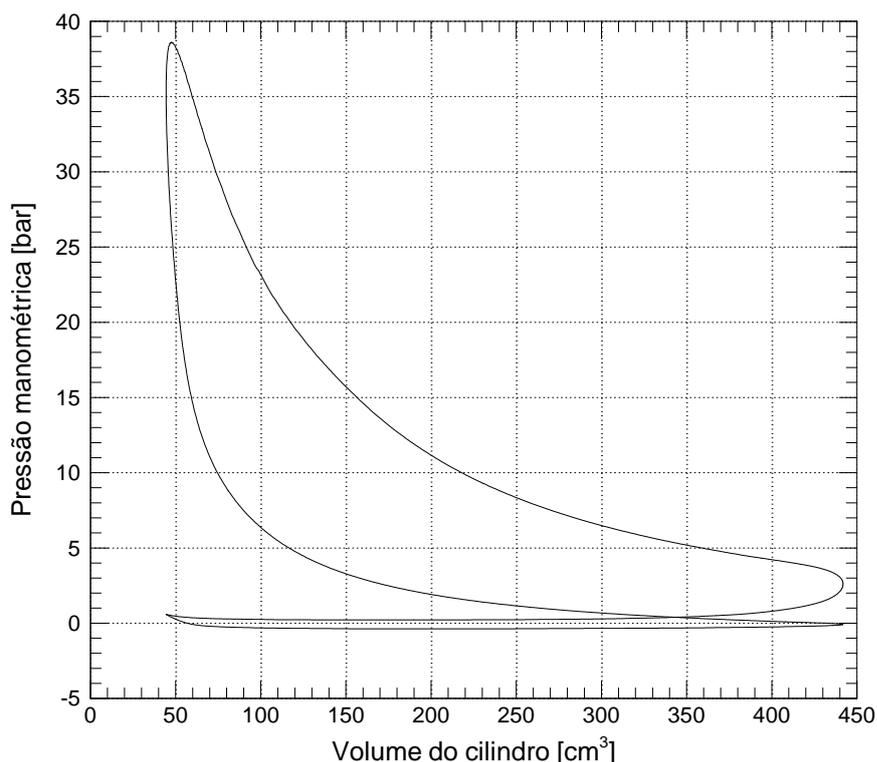


Figura 5.14 – Diagrama pressão-volume para o caso específico em análise.

O ciclo tem seu início com uma pressão manométrica de 0,5 bar e volume do cilindro de 50 cm³, ou seja, no ponto morto superior. A partir daí o motor passa a realizar o bombeamento da mistura ar/combustível para dentro do cilindro e, desta forma, recebe trabalho. No momento em que o pistão atinge o ponto morto inferior, a pressão começa a sua elevação em função da compressão dos gases presentes no interior do cilindro. Este aumento de pressão também caracteriza o recebimento de trabalho pelo motor, visto que para este aumento de pressão ocorre uma diminuição do volume da câmara de combustão.

O motor passa a realizar trabalho no momento em que atinge o ponto morto superior, pois neste instante a energia dos gases queimados, liberada na forma de pressão, é expandida através do aumento do volume da câmara de combustão. Este trabalho é realizado até o ponto morto inferior, quando a câmara de combustão passa mais uma vez a receber trabalho até o

final do ciclo do motor. A região do ciclo que corresponde à admissão e a exaustão apresentam as características típicas de um motor levemente estrangulado, ou seja, a situação de válvula borboleta completamente aberta (*WOT – wide open throttle*). Esta situação é obtida, neste modelo, em função da ausência de quaisquer restrições no sistema de admissão, ou seja, em razão da ausência de uma válvula borboleta capaz de regular o fluxo da mistura ar/combustível para dentro do cilindro.

A Figura 5.15 apresenta o valor para o c_p no interior do cilindro em função do ângulo de manivela. O valor para o c_p de cada uma das espécies químicas que participam da combustão é definido por dois polinômios em função da temperatura (para duas faixas de temperatura) de quinto grau cada um (as espécies químicas são assumidas como gás perfeito).

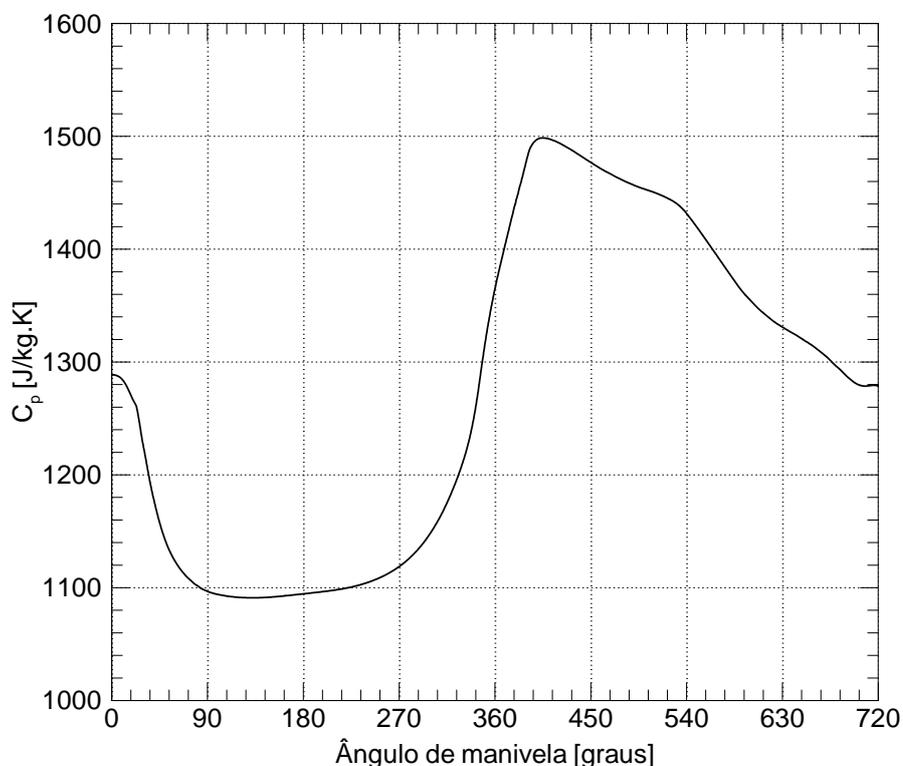


Figura 5.15 – c_p no interior do cilindro em função do ângulo de manivela.

A variação do c_p reflete a variação da temperatura e da composição da mistura. Os gases que são produtos da combustão (CO_2 e H_2O) possuem c_p maior do que os reagentes. Assim, a diminuição do c_p durante a admissão deve-se à diminuição da temperatura e à diluição com o ar. O pico de c_p ocorre em um ângulo de manivela próximo ao do pico de temperatura.

A Figura 5.16 apresenta o valor da razão de calores específicos, γ ($=c_p/c_v$), no interior do cilindro em função do ângulo de manivela. Verifica-se que γ apresenta um valor máximo

de 1,38, próximo ao valor de 1,4 para o ar seco, e valor mínimo igual 1,25. O valor médio de γ corresponde a 1,32.

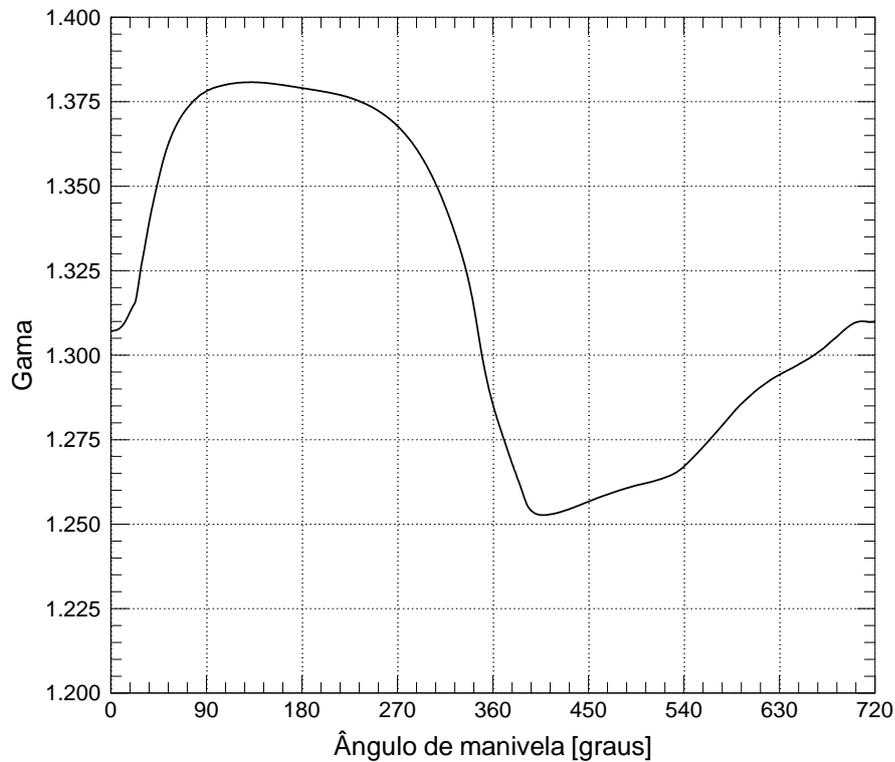


Figura 5.16 – γ (c_p/c_v) no interior do cilindro em função do ângulo de manivela.

A velocidade de propagação da frente de chama varia de acordo com diversos fatores, dentre eles encontram-se as propriedades de cada combustível e a dinâmica do escoamento da mistura não-queimada. Uma característica intrínseca de cada mistura de combustível e oxidante é a sua velocidade de chama laminar. Esta velocidade é definida como a velocidade relativa e normal à frente de chama com que os gases não-queimados se aproximam da frente de chama e se transformam em produtos de reação sob condições laminares de escoamento. Rigorosamente, esta é a velocidade de deslocamento (*displacement flame speed*) (Poinsot *et al.*, 2000). Um gráfico da velocidade de chama laminar para diversos combustíveis em função da razão relativa combustível/ar é apresentado na Figura 5.17.

No entanto, a propagação da frente de chama de combustão na mistura pré-misturada no interior da câmara de combustão, conforme discutido anteriormente, é influenciada pelo campo de escoamento local dos gases não-queimados. Desta forma, a velocidade de propagação da frente de chama é uma função do combustível e da sua relação estequiométrica com o ar, bem como das características do escoamento para a mistura não-queimada (temperatura, intensidade turbulenta, velocidade, pressão, etc.).

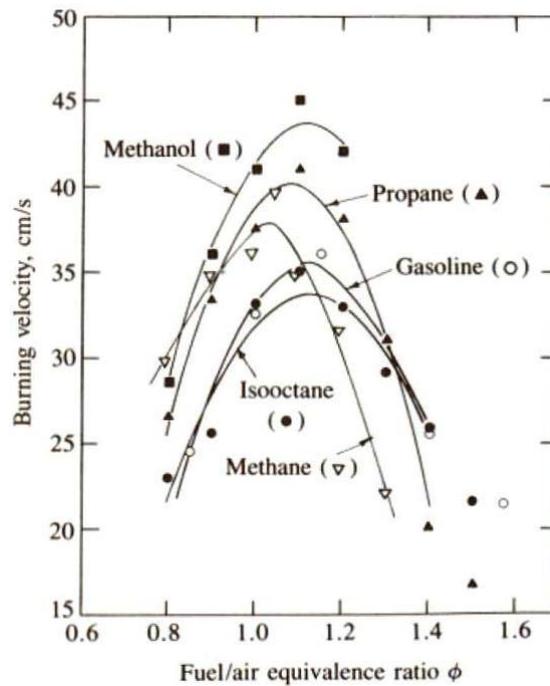


Figura 5.17 – Velocidade de chama laminar para diversos combustíveis em função da razão relativa combustível/ar, para 1 atm e 300 K. Adaptado de Heywood (1988).

Aqui, pode-se fazer uma estimativa da velocidade de combustão a partir dos campos de temperatura. A Figura 5.18 apresenta os contornos de temperatura para diferentes ângulos de manivela. Tomando-se a isoterma de 1800 K como referência e medindo o deslocamento médio desta isoterma entre dois intervalos de tempo consecutivos, pode-se estimar a velocidade absoluta da chama, ou seja, a velocidade da chama em relação a um referencial fixo. A velocidade absoluta média de propagação da frente de chama, considerando um intervalo de cerca de 54° , entre os ângulos de manivela de 318° a 372° , é de cerca de 15,6 m/s.

A obtenção da velocidade de propagação da chama em relação ao escoamento exigiria o cálculo da média da velocidade do escoamento nestes mesmos intervalos de tempo para a posterior subtração da velocidade absoluta da chama. Este procedimento não foi realizado em virtude do enorme tempo necessário para a realização desta atividade. Mesmo que a velocidade de propagação de chama não tenha sido calculada, a velocidade absoluta de chama fornece uma boa estimativa do comportamento da frente de combustão para a queima da mistura de ar e metano.

A Figura 5.19 apresenta os vetores velocidade para os ângulos de manivela iguais a 60° e a 90° . Verifica-se, através dos vetores velocidade, a magnitude da velocidade do escoamento no processo de admissão da mistura ar/combustível pelo motor. Na seção de passagem da válvula de admissão, o escoamento adquire níveis de velocidade próximos a 250

m/s e, à medida que o escoamento circula pelo interior do cilindro, a velocidade é reduzida para valores próximos a 50 m/s.

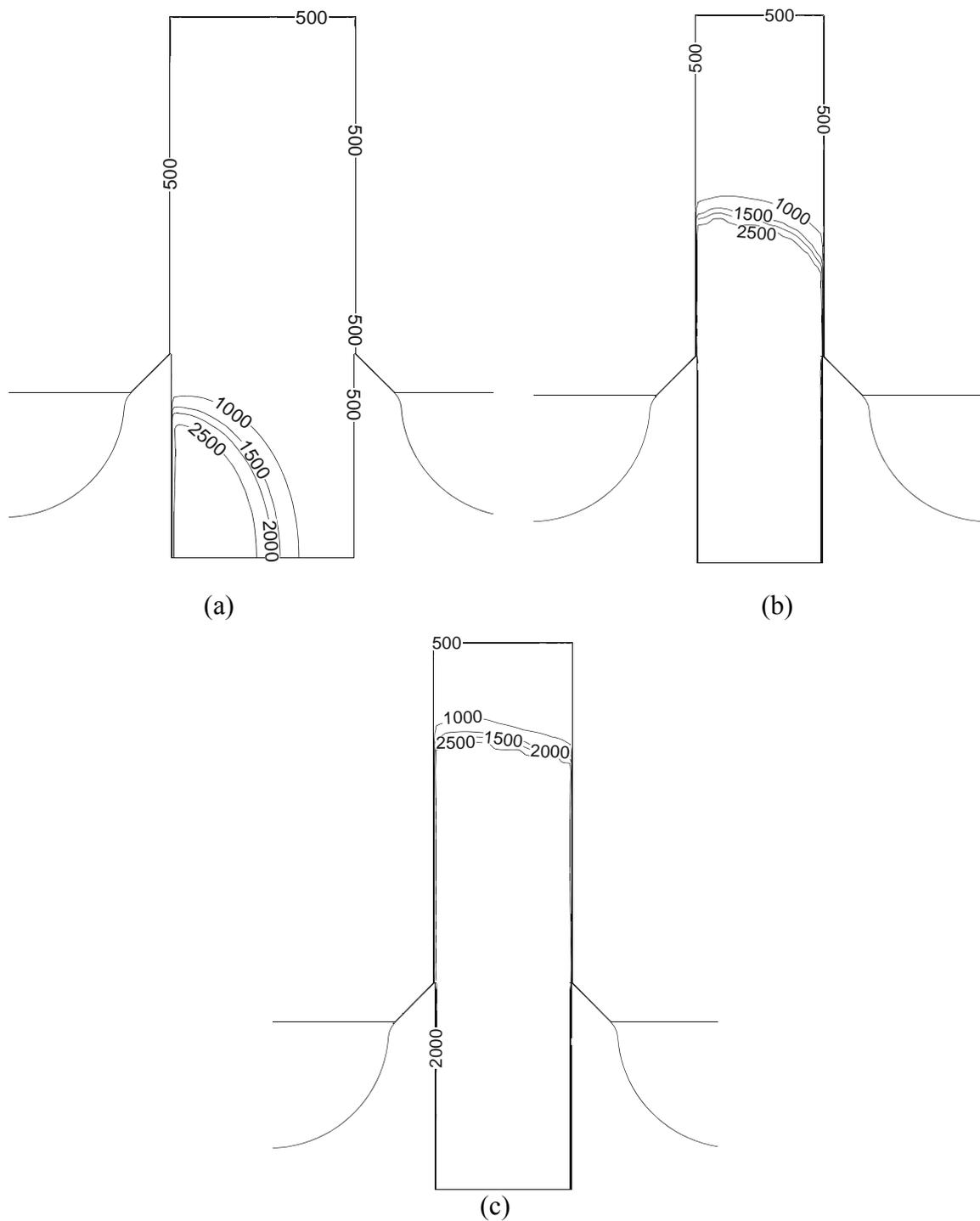


Figura 5.18 – Campos de temperatura [K] para diferentes ângulos de manivela: (a) 336°, (b) 354° e (c) 372°.

Na primeira imagem, Figura 5.19 (a), aparecem cinco grandes regiões de recirculação no interior do cilindro: duas próximas ao cabeçote, duas a meio caminho entre a região central

e a parede do cilindro e uma na região central do cilindro próxima a válvula de admissão. Estes padrões de escoamento são típicos do que se denomina de *tumble* (Heywood, 1988).

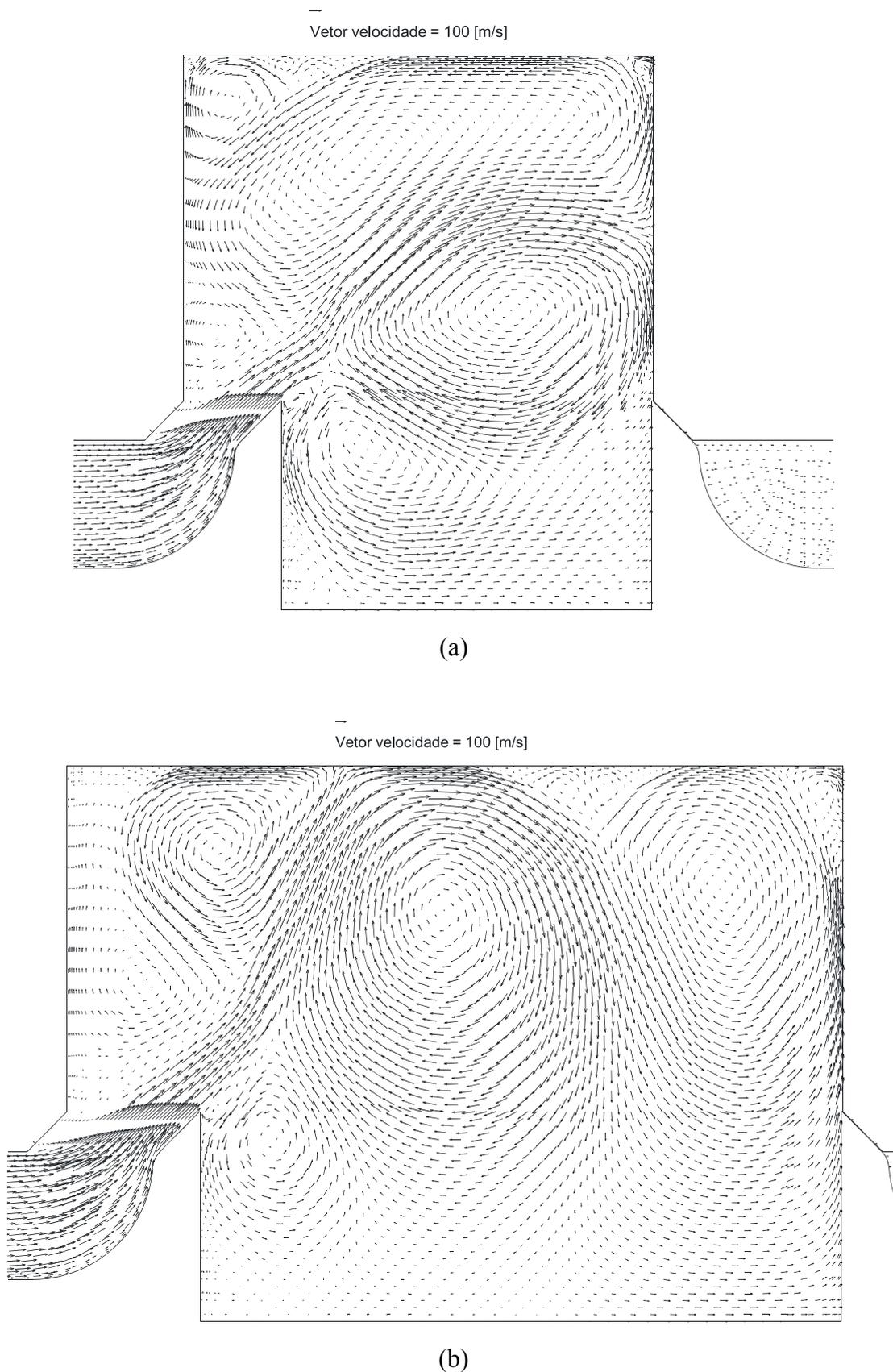


Figura 5.19 – Campos de velocidade para dois ângulos de manivela: (a) 60° e (b) 90° .

Na segunda imagem, Figura 5.19 (b), no entanto, aparecerem quatro grandes regiões de recirculação: três a meio caminho entre a região central e a parede do cilindro e uma nas proximidades da válvula de admissão. Estas regiões correspondem, assim como na imagem anterior, ao movimento de *tumble*, criado em razão do movimento descendente do pistão. Estes vetores velocidade, juntamente com os campos de intensidade turbulenta que são apresentados logo a seguir, são de grande importância para a análise do processo de combustão dos diferentes casos simulados.

A Figura 5.20 ilustra os campos de intensidade turbulenta para os ângulos de manivela iguais a 60° e a 90° . O nível de intensidade turbulenta tem um papel fundamental na propagação da frente de chama e pode ser ajustado através de várias técnicas, tais como modificações do sistema de admissão e da geometria da câmara de combustão. De fato, um importante objetivo do sistema de indução é o de prover o máximo possível de ar para o cilindro, e ao mesmo tempo, estabelecer um padrão de escoamento favorável para a ignição e posterior combustão da mistura.

O escoamento proveniente do sistema de admissão sai da válvula na forma de um jato cônico que se separa tanto da superfície da válvula como da superfície do assento da válvula. A interação entre este jato e a região interna do cilindro (*shear layer*) resulta em uma grande produção de energia cinética turbulenta. A deformação do escoamento na borda do jato gera a maior parte da turbulência presente no interior do cilindro durante o processo de indução. No entanto, à medida que o pistão se aproxima do ponto morto inferior, o jato passa a perder quantidade de movimento e, conseqüentemente, a produção da turbulência é reduzida rapidamente pelo decaimento da taxa de deformação do escoamento.

Após o fechamento da válvula de admissão, o campo de escoamento presente no interior do cilindro é a condição inicial para o estágio da compressão. Quando o pistão inicia o movimento de subida, o padrão de recirculação do escoamento fruto do processo de indução (*tumble*) é amortecido pelas forças de pressão. Apesar do alto grau de não-homogeneidade da turbulência durante o processo de indução, no processo de compressão tanto esta característica como a intensidade turbulenta diminuem os seus efeitos. O campo de velocidade, conforme apresentado pelos vetores velocidade na Figura 5.19, e de intensidade turbulenta ao final do processo de compressão, especialmente na região próxima à vela de ignição, é de crucial importância, visto que a propagação da chama após a ignição estará diretamente ligada a esta região de escoamento no interior do cilindro.

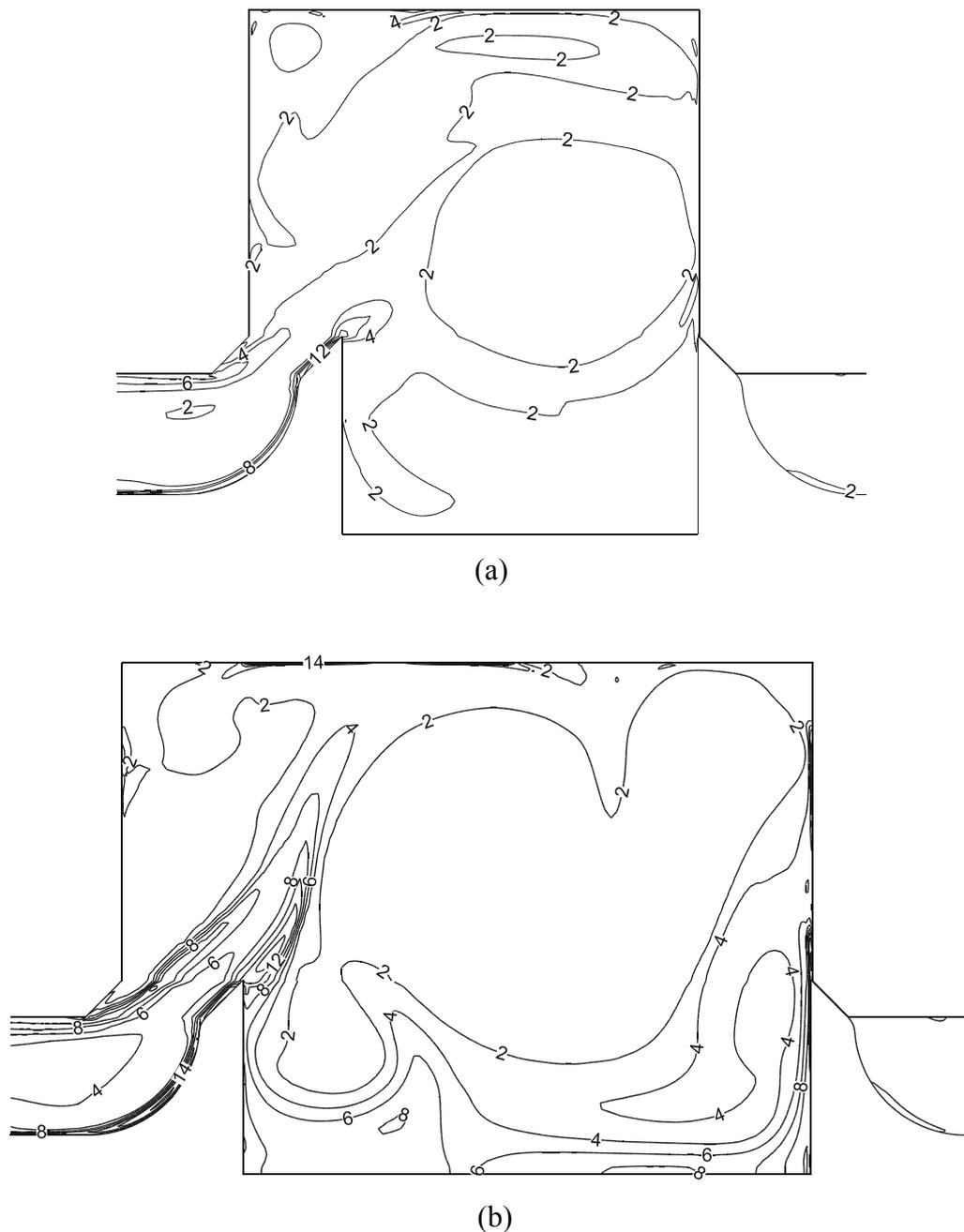


Figura 5.20 – Campos de intensidade turbulenta para os ângulos de manivela (a) 60° e (b) 90° .

5.3 Variações ciclo-a-ciclo

Um motor de quatro tempos necessita de 720° de revolução em relação ao virabrequim (eixo de manivela) para realizar um ciclo completo desde a admissão da mistura ar/combustível até a exaustão dos gases queimados pelo sistema de descarga.

Na inicialização da simulação do primeiro ciclo são feitas estimativas para os campos iniciais de pressão, temperatura, velocidade, concentrações e níveis de turbulência. No entanto, as estimativas iniciais, por mais próximas que estejam da condição real, acabam exigindo alguns ciclos de simulação para que se alcance um regime permanente. Além das

variações de ciclo para ciclo, resultantes das estimativas dos campos iniciais, o modelo pode também apresentar variações cíclicas inerentes ao funcionamento real do motor. Em um motor real, essas variações podem ser constatadas através de medições da pressão no interior do cilindro ao longo de vários ciclos de operação do motor. Como a pressão está diretamente relacionada ao processo de combustão, variações no valor da pressão sinalizam variações no processo de combustão de um ciclo para outro.

As variações cíclicas no processo de combustão são causadas pela variação, ciclo a ciclo, da dinâmica da mistura no interior do cilindro no momento da ignição, da admissão de mistura ar/combustível ou da mistura de ar puro da admissão com gases residuais da exaustão. Esta última característica não contribui para variações nos resultados do presente modelo, visto que não há recirculação de gases residuais e nem cruzamento de válvulas pelo motor. À medida que a razão relativa ar combustível aumenta, ou seja, a mistura torna-se mais diluída, as variações da combustão ciclo-a-ciclo aumentam. Esta condição tende a acontecer por duas causas principais. A primeira surge quando um ciclo apresenta um processo de combustão tão lento que a mistura continua a queimar, mesmo quando a válvula de exaustão iniciou a sua abertura, provocando assim um processo de queima parcial. A segunda causa é devida à falha da ignição, ou seja, devido à extrema diluição da mistura. A falha de ignição tanto pode ocorrer porque a mistura se encontra fora da região de inflamabilidade do combustível, como por excesso de deformação e resfriamento do núcleo de ignição por excesso de turbulência na região da vela de ignição. No entanto, vale lembrar que as variações ciclo-a-ciclo deste modelo estão mais intimamente ligadas às variações numéricas (erros de truncamento, convergência, etc.) do que às variações causadas pelo funcionamento real do motor.

O regime permanente de funcionamento do motor é obtido quando cada um dos parâmetros globais em análise não sofre uma variação maior do que 5 % na comparação entre o ciclo atual e seu antecessor. A avaliação desta variação torna-se mais significativa à medida que um conjunto maior de número de ciclos é utilizado. Ressalta-se, porém, que a simulação de um grande número de ciclos torna-se proibitivo em função do custo computacional. Para as simulações apresentadas neste trabalho, verificou-se que é necessária a simulação de 5 a 6 ciclos completos para que o motor atinja um estado permanente de funcionamento.

A Figura 5.21 ilustra comparações típicas realizadas para a pressão no cilindro, a fim de verificar o número de ciclos necessários para a convergência do caso base. Observa-se que pouca variação ocorre do ciclo 2 para o ciclo 3. Já do ciclo 3 para o ciclo 4, ocorre uma pequena elevação da pressão máxima, mas com uma diminuição da variação no ciclo 5, garantindo que o caso simulado encaminha-se para o regime permanente de funcionamento do motor.

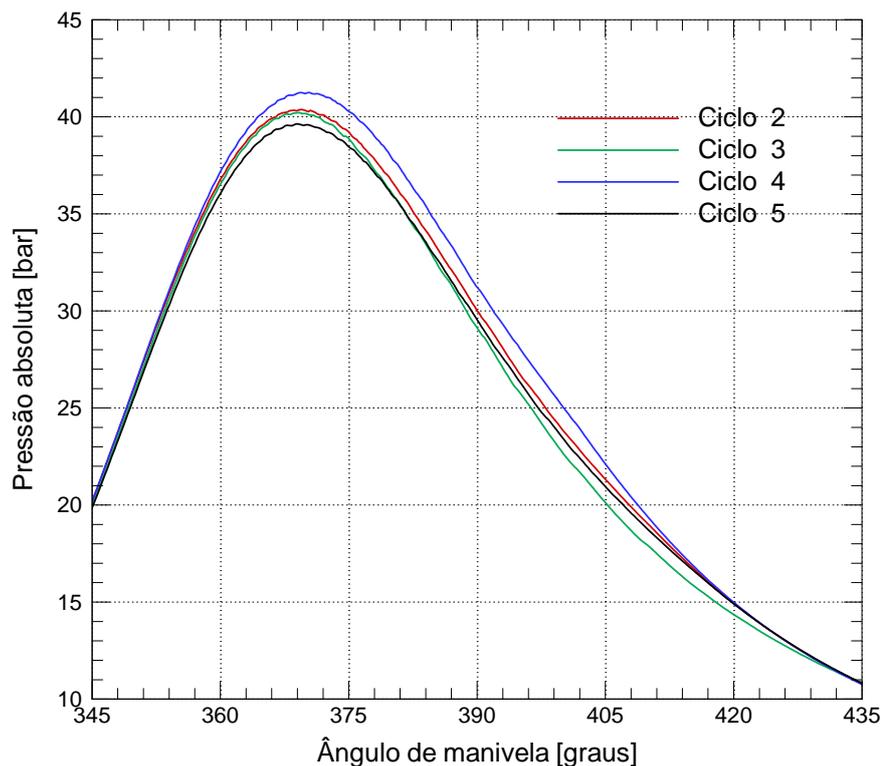


Figura 5.21 – Pressão no interior do cilindro em função do ângulo de manivela para 4 ciclos completos de simulação.

Após a análise detalhada do caso base, conforme apresentado nesta seção, foram realizados testes adicionais considerando diferentes variações nos parâmetros de operação do motor. Os resultados dessas análises são apresentados nas próximas seções.

5.4 Avaliação da influência de parâmetros de operação do motor

Nesta seção são analisados, do ponto de vista qualitativo, diferentes aspectos de operação do motor. Os efeitos da mudança no ponto de ignição, na temperatura de parede, bem como na composição da mistura ar/combustível são avaliados através das propriedades termodinâmicas do interior do cilindro relacionadas à combustão e dos parâmetros globais de desempenho do motor.

5.4.1 Efeito do ponto de ignição

O efeito do ponto de ignição é avaliado por meio de sete diferentes condições de operação. O modelo é resolvido para as condições apresentadas na Tabela 5.1, assumindo

uma velocidade de rotação de 4.500 rpm, uma temperatura de parede igual a 403 K e uma relação de equivalência igual a 1.

Partindo do ponto morto superior, no ângulo de manivela igual a 360° , o ponto de ignição é definido pelo avanço (ou seja, a ignição ocorre antes do ponto morto superior), em graus, em que ocorre a deposição de energia pela vela de ignição. Os avanços de ignição simulados foram os seguintes: 24° , 30° , 36° , 42° , 48° , 54° e 60° .

Quando o processo de combustão é iniciado muito precocemente em um ciclo do motor, ocorre um aumento de pressão nos gases no interior do cilindro. Porém, como o movimento do pistão é ascendente, o trabalho é realizado contra o pistão. Por sua vez, quando o processo de combustão é iniciado muito tardiamente, o pico de pressão alcançado é menor e, com a queda da temperatura devido à expansão, a velocidade de propagação da frente de combustão diminui. Neste caso, a combustão pode não ocorrer de forma completa. Comportamentos de ignição anormal estão também presentes em motores reais, ressaltando-se a falha de ignição, a pré-ignição e a detonação. A falha de ignição ocorre quando, mesmo havendo a deposição de energia pela vela de ignição, a chama inicial no núcleo de ignição não consegue se propagar para o resto da mistura. A pré-ignição ocorre quando uma superfície da câmara de combustão apresenta uma temperatura muito elevada e provoca, assim, uma ignição anormal da mistura, antes da ocorrência da ignição gerada pela centelha da vela. A detonação (nome dado ao ruído transmitido pela estrutura do motor) ocorre quando uma ignição espontânea é ocasionada por uma porção de gás que se encontra à frente da frente de propagação da chama. Este fenômeno, que ocorre normalmente após a deposição da centelha pela vela de ignição, caracteriza-se pela formação e propagação de uma frente de detonação.

Naturalmente, espera-se que um motor em uma determinada condição de operação produza o maior trabalho com o menor consumo de combustível possível, sem a presença de falha de ignição ou ignição anormal. Este ponto, de maior trabalho por menor consumo, é definido como o ponto de máximo torque do motor (*MBT – maximum brake torque*). Para uma mesma velocidade de rotação, um mesmo fluxo de admissão, uma mesma relação relativa de ar/combustível e um mesmo carregamento (aceleração), a variação do ponto de ignição permite determinar o ponto de máximo torque do motor para a condição de operação estabelecida.

Os parâmetros globais de desempenho obtidos para o motor simulado com os sete diferentes avanços de ignição são apresentados na Tabela 5.4. O torque e o consumo específico de combustível para os avanços de ignição simulados, conforme os resultados da Tabela 5.4, são apresentados graficamente na Figura 5.22.

Pelos valores apresentados na Tabela 5.4 é possível verificar a existência de um ponto ótimo de ignição próximo ao avanço de ignição igual a 54° . A partir deste ponto, à medida

que o avanço de ignição diminui (se aproxima do ponto morto superior), o motor perde trabalho, aumenta o consumo de combustível e, conseqüentemente, tem reduzida a sua eficiência de conversão do combustível. O mesmo comportamento é apresentado quando o avanço de ignição aumenta (se afasta do ponto morto superior), tal como é identificado para o caso com avanço de ignição igual a 60°.

Tabela 5.4 – Parâmetros de desempenho para os diferentes avanços de ignição.

	Avanço de ignição [°]						
	24	30	36	42	48	54	60
Eficiência volumétrica	0,72	0,72	0,74	0,74	0,74	0,74	0,74
Trabalho [J]	152,97	192,25	248,50	306,18	335,80	346,80	289,97
Torque [N.m]	0,21	0,27	0,34	0,43	0,47	0,48	0,40
Potência [kW]	5,74	7,21	9,32	11,48	12,59	13,00	10,87
Eficiência de conversão do combustível	0,15	0,19	0,24	0,30	0,33	0,34	0,28
Consumo específico de combustível [g/kWh]	466,44	374,94	293,62	238,66	219,12	211,63	252,29

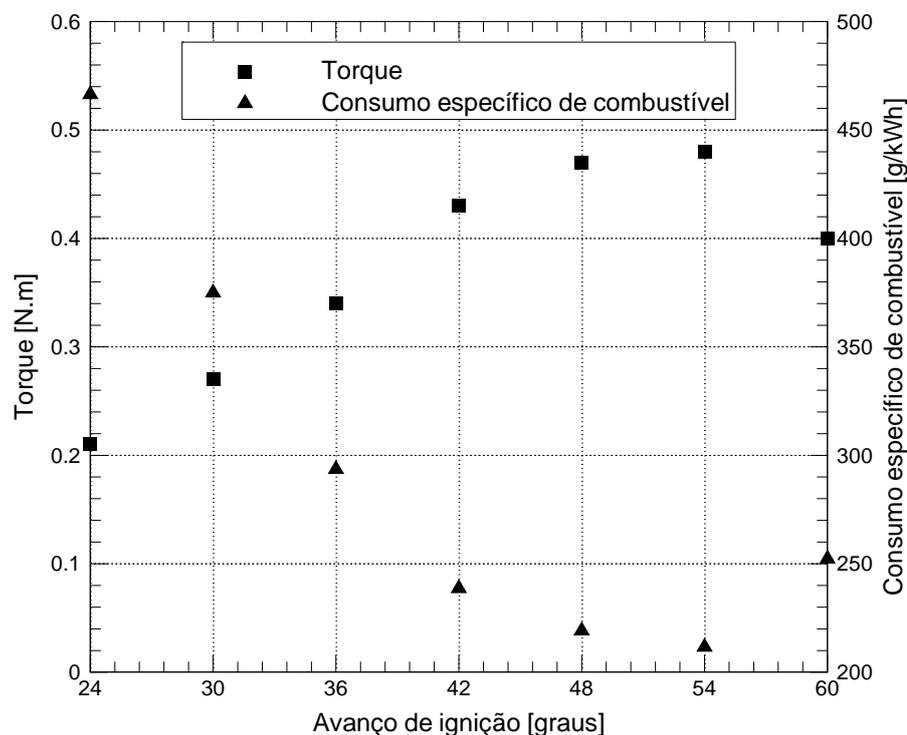


Figura 5.22 – Torque e consumo específico de combustível em função do avanço de ignição.

Observa-se que o modelo utilizado não permite detectar a ocorrência de detonação. Para tanto, torna-se necessário o uso de um modelo de cinética química detalhada para as reações de combustão, incluindo as reações de combustão em baixa temperatura, visto que a

detonação inicia-se normalmente em regiões próximas às paredes. Somando-se a isto as dificuldades inerentes à modelagem do escoamento turbulento, a simulação da detonação torna-se um problema de grande complexidade.

A Figura 5.23 apresenta um comparativo entre as curvas de pressão no interior do cilindro para os diferentes avanços de ignição. O gráfico à esquerda apresenta a diferença entre as pressões para os avanços de ignição de 24° a 42°, enquanto o gráfico da direita se refere aos avanços de ignição de 48° a 60°. Verifica-se que o maior pico de pressão é apresentado para o avanço de ignição igual a 54° e que, dentre os avanços simulados, o menor pico de pressão ocorre para o avanço de ignição igual a 24°. Os resultados para os picos de pressão confirmam, por sua vez, que o avanço de ignição relativo ao maior pico de pressão no interior do cilindro produz o maior trabalho líquido para o motor.

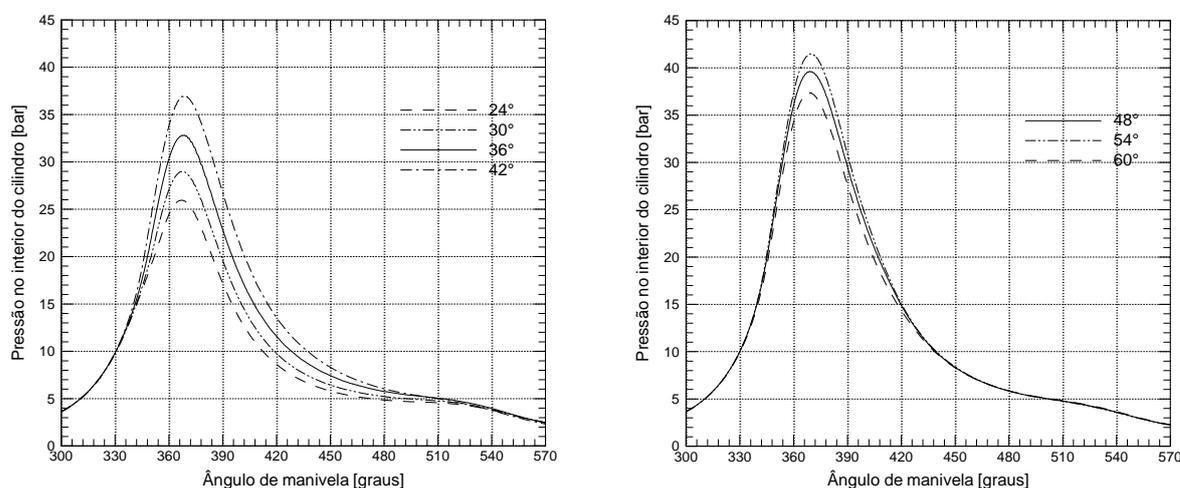


Figura 5.23 – Pressão no interior do cilindro em função do avanço de ignição.

Cabe aqui uma nota a respeito do uso de elevados avanços de ignição. A razão de compressão (10:1) adotada para o motor simulado está abaixo daquela utilizada em motores de produção a gás natural (14:1). Somado a este fato a simplificação da geometria adotada para a câmara de combustão, o modelo necessita, então, do uso de grandes avanços de ignição para que a combustão ocorra sem a incidência de falhas de ignição ou mesmo de ignição anormal. Da mesma forma, Thobois *et al.* (2003) e de Caillol *et al.* (2002) também utilizam elevados avanços de ignição em motores operando a gás natural com razões de compressão de 10,5:1 e de 8,5:1, respectivamente, a fim de evitar anormalidades no processo de ignição.

A Figura 5.24 apresenta um comparativo entre as temperaturas de exaustão dos gases queimados para os diferentes avanços de ignição. Verifica-se que, com a diminuição do avanço de ignição, há um aumento na temperatura de exaustão dos gases queimados. Este

aumento de temperatura está atrelado ao menor trabalho realizado e à diminuição da transferência de calor para as paredes em virtude do processo de combustão ter acontecido tardiamente no interior do cilindro.

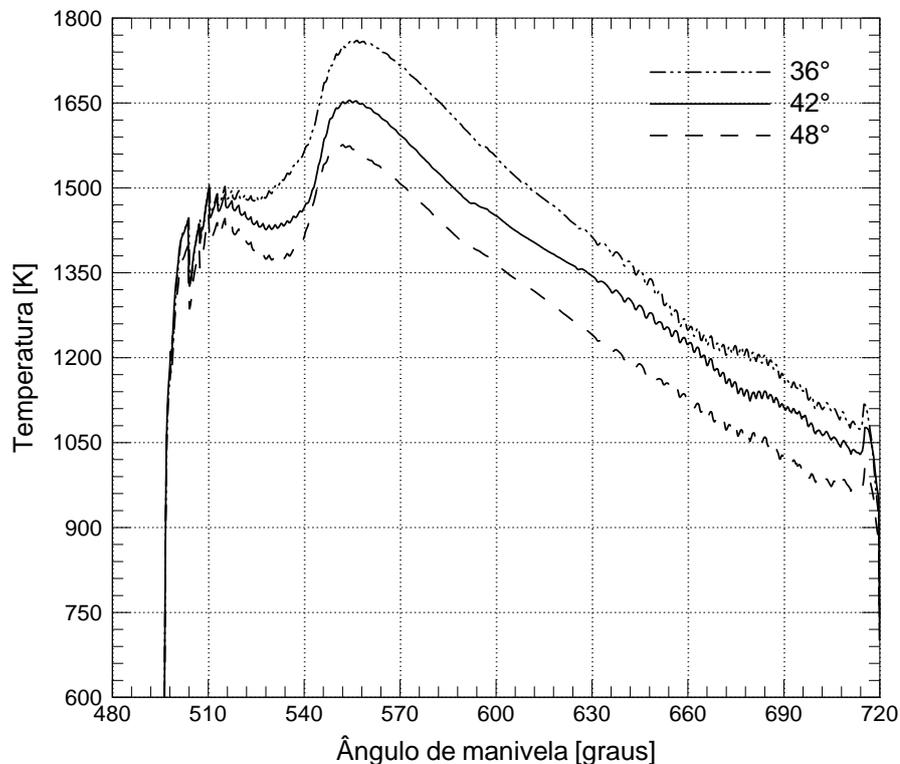
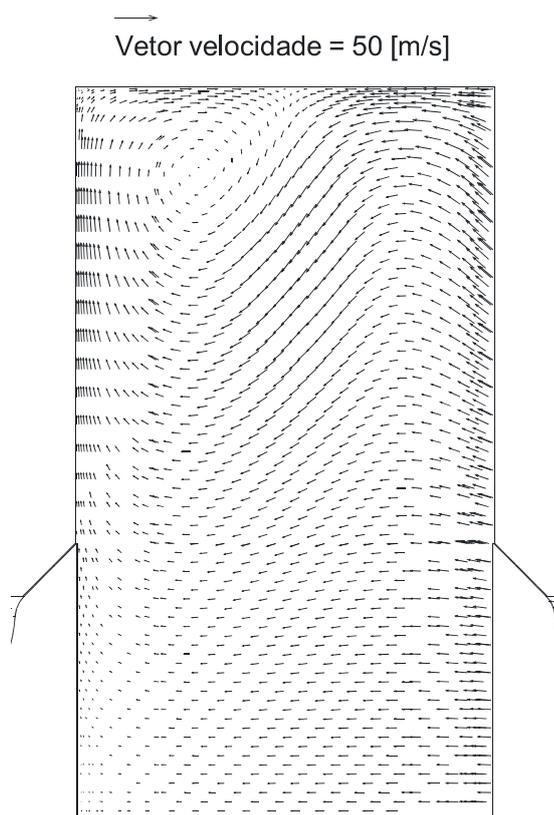


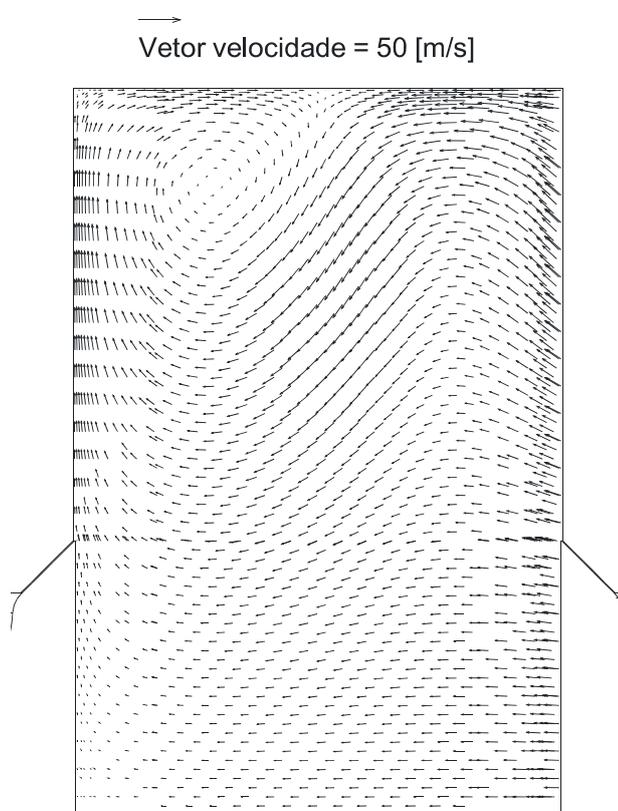
Figura 5.24 – Temperatura dos gases na abertura da válvula de exaustão em função do ângulo de manivela.

A Figura 5.25 apresenta os vetores velocidade no instante inicial de deposição de energia da ignição para três diferentes avanços de ignição, com o objetivo de apresentar suas características no início da ignição. O campo de velocidades é de grande importância no processo de propagação da chama e, desta forma, no processo de combustão da mistura ar/combustível.

Verifica-se que os vetores velocidade da Figura 5.25 (c), correspondente a um avanço de ignição de 54°, apresentam as maiores magnitudes de velocidade em comparação às magnitudes das demais condições. Isto pode ser explicado pela mudança do escoamento médio no processo de compressão da mistura ar/combustível no interior do cilindro. À medida que a mistura é comprimida, o escoamento é amortecido pelas forças de dissipação viscosa e, assim, ocorre a diminuição dos níveis de velocidade e de turbulência no interior do cilindro.



(a)



(b)

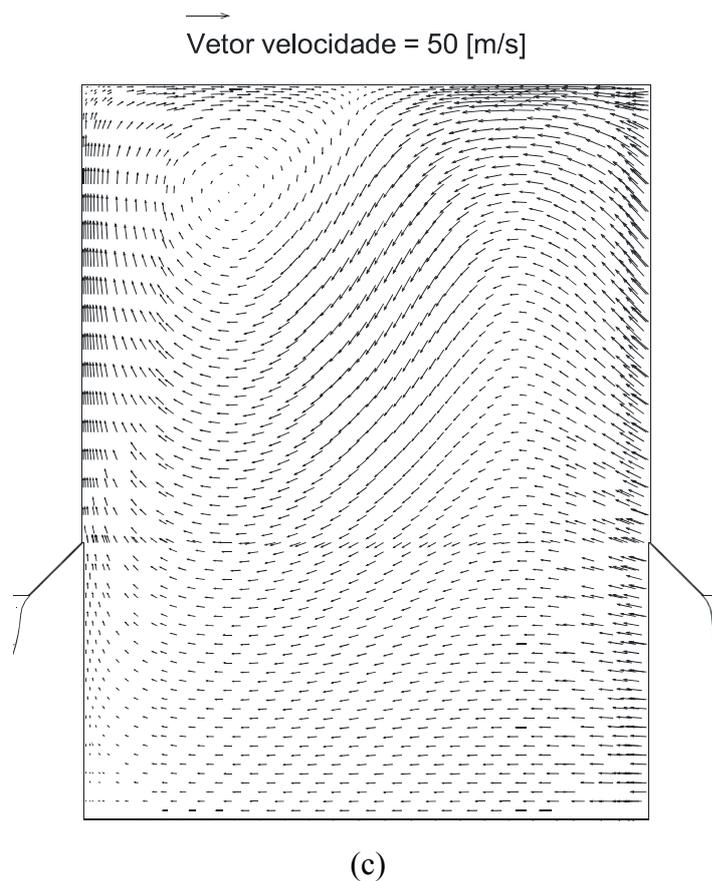


Figura 5.25 – Campos de velocidade [m/s] no instante inicial da ignição para os avanços de ignição iguais a: (a) 42° , (b) 48° e (c) 54° .

Sabendo que o processo de combustão depende das características da mistura não-queimada, verifica-se que os vetores velocidade da Figura 5.25 (c) apresentam uma melhor condição para a propagação da frente de chama. De fato, estes níveis de velocidade, juntamente com os níveis de intensidade turbulenta para a mesma condição, permitem afirmar que um aumento no avanço de ignição gera um aumento no trabalho realizado pelo motor, visto que o avanço de ignição igual a 54° apresenta o maior trabalho em comparação ao avanço de ignição igual a 48° , o qual, por sua vez, apresenta um maior trabalho em relação ao avanço de ignição de 42° .

5.4.2 Efeito da temperatura de parede

O efeito da temperatura de parede é avaliado por meio da comparação de duas condições. O modelo é resolvido para as condições apresentadas na Tabela 5.1, para uma velocidade de rotação de 4.500 rpm, avanço de ignição de 48° e relação de equivalência igual a 1. As duas condições são representadas por temperaturas das paredes em contato com o interior do cilindro (válvulas, cabeçote, pistão e cilindro) iguais a 403 K e 503 K. Os

parâmetros globais de desempenho obtidos para o motor simulado com essas temperaturas de parede são apresentados na Tabela 5.5.

Tabela 5.5 – Parâmetros de desempenho para as diferentes temperaturas de parede.

	Temperatura de parede [K]	
	403	503
Eficiência volumétrica	0,74	0,71
Trabalho [J]	346,80	382,66
Torque [N.m]	0,48	0,53
Potência [kW]	13,00	14,35
Eficiência de conversão do combustível	0,34	0,39
Consumo específico de combustível [g/kWh]	211,63	183,84

Inicialmente verifica-se que o aumento em 100 K na temperatura de parede resultou em um aumento de 10 % na potência fornecida pelo motor. Esse aumento na temperatura de parede, no entanto, resultou em uma diminuição da eficiência volumétrica do motor em cerca de 4 %, e em um aumento na eficiência de conversão do combustível em cerca de 15 %. Vale destacar que a simulação para a temperatura de parede igual a 503 K atingiu o regime permanente com um menor número de ciclos, em comparação à simulação com a temperatura de parede igual a 403 K. Sabendo que ambas as simulações foram realizadas segundo as mesmas condições de contorno, salvo a mudança na temperatura da parede, verifica-se que esta temperatura é uma condição de contorno de grande importância para a simulação correta do motor.

O fluxo de calor liberado pelo motor, através da queima dos gases no interior do cilindro, é transmitido para as paredes da câmara de combustão através de dois mecanismos de transferência de calor: convecção e radiação. Em motores de injeção indireta e ignição por centelha, a importância relativa do mecanismo de radiação é muito menor. Isto se deve à ausência de gotas de líquido ou partículas sólidas, típicas dos motores de injeção direta de combustível, e à grande espessura ótica da mistura gasosa em combustão. Assim, normalmente este mecanismo é negligenciado. Em um balanço de energia típico em um motor, a taxa de transferência de calor para o sistema de refrigeração representa de 20 a 36 % da energia do combustível (Heywood, 1988). A transferência de calor devido à convecção pode ser modelada em função da temperatura do gás no interior da câmara de combustão, do coeficiente de troca térmica por convecção e da temperatura da parede do cilindro. A temperatura da parede do cilindro é mantida constante. A temperatura do gás no interior da câmara de combustão varia em função do ângulo de manivela (admissão, compressão,

combustão, expansão e exaustão) e o coeficiente de troca térmica por convecção varia em função da área, das temperaturas e da dinâmica do escoamento relacionadas à troca térmica.

A Figura 5.26 apresenta a temperatura do gás no interior do cilindro, em função do ângulo de manivela, para as duas simulações com temperaturas de parede diferentes. Através do gráfico é possível verificar como a temperatura de parede influencia a temperatura do gás, indicando que os picos de temperatura apresentam uma diferença de cerca de 650 K.

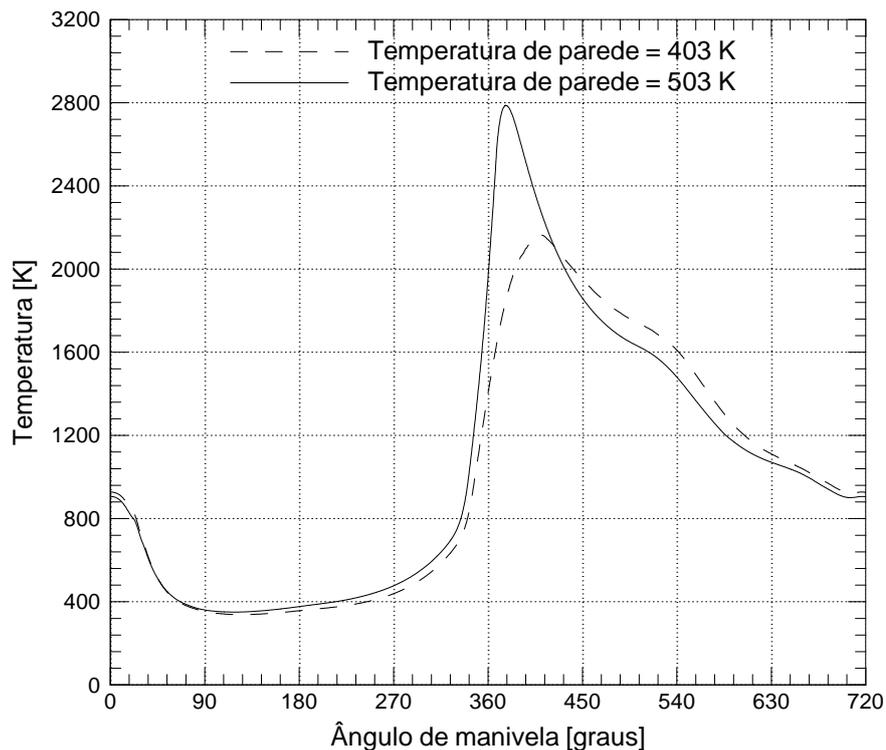


Figura 5.26 – Temperatura no interior do cilindro em função do ângulo de manivela para as duas condições de temperaturas de parede.

Ao receber mais calor das paredes da câmara de combustão a mistura não-queimada, para o caso com a temperatura de parede igual a 503 K, apresenta níveis de pressão e temperatura um pouco acima do caso com a temperatura de parede igual a 403 K, o que resulta em um maior trabalho realizado pelo motor.

A Figura 5.27 e a Figura 5.28 apresentam os fluxos de calor através das paredes da câmara de combustão, em função do ângulo de manivela, para as simulações com temperaturas de parede iguais a 403 e 503 K, respectivamente. Os fluxos de calor para as paredes para as duas condições de temperatura apresentam comportamento similar até o momento da ignição. A partir desse instante, a condição de temperatura mais elevada (503 K) apresenta uma sensível diferença em comparação ao outro caso.

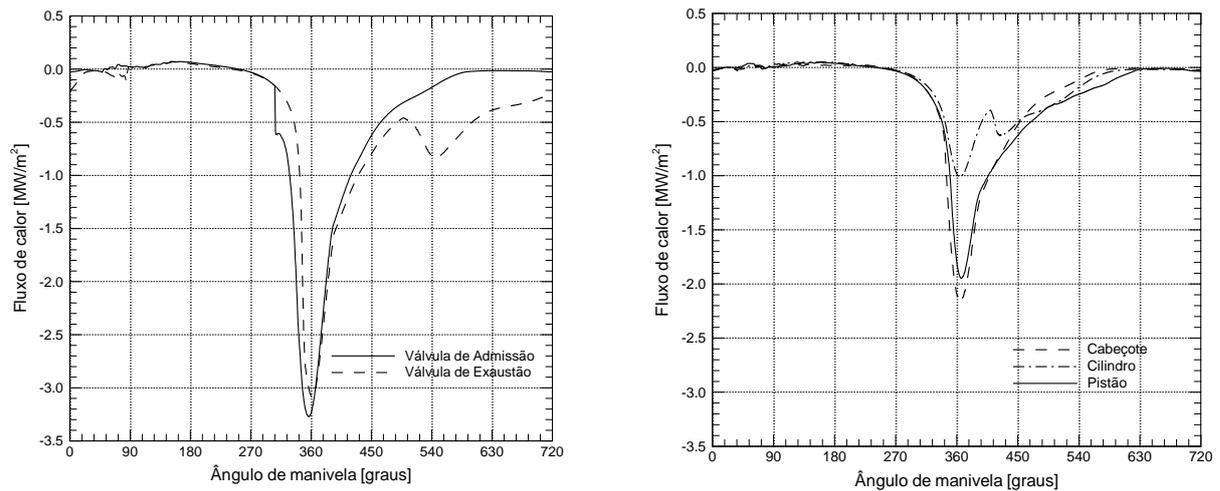


Figura 5.27 – Fluxos de calor em função do ângulo de manivela para a temperatura de parede igual a 403 K.

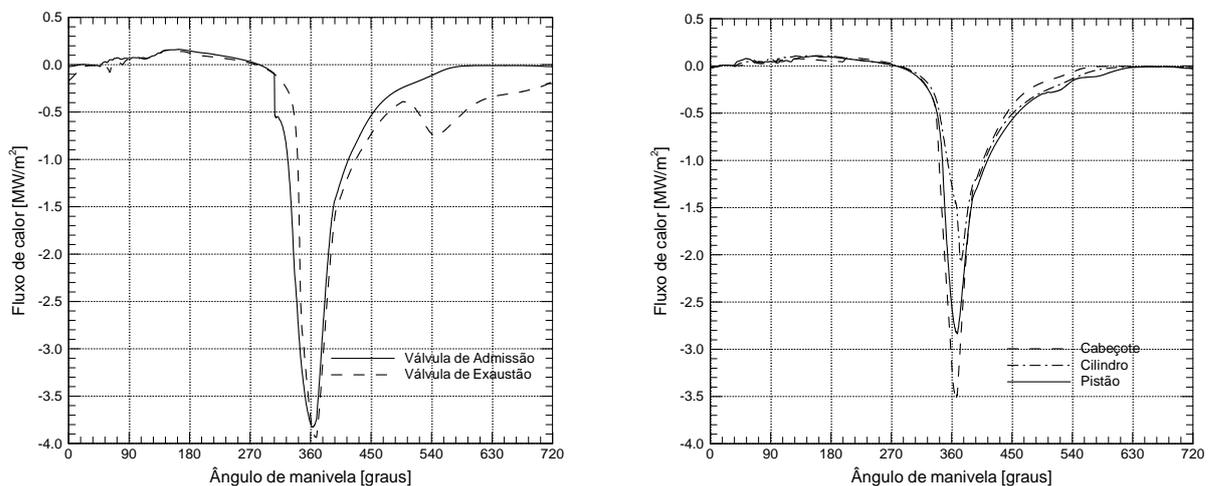


Figura 5.28 – Fluxos de calor em função do ângulo de manivela para a temperatura de parede igual a 503 K.

Verifica-se que os fluxos de calor para as válvulas de admissão e de exaustão, para a temperatura de parede de 403 K, apresentam valores de pico próximos a 3,5 MW/m², enquanto, para a temperatura de parede de 503 K, os valores alcançados são próximos a 4 MW/m². O mesmo comportamento se repete para os fluxos de calor no cabeçote, cilindro e pistão. O fluxo de calor para o pistão, por exemplo, apresenta valores de pico próximos a 2,1 MW/m² para a temperatura de parede de 403 K e de 3,5 MW/m² para a temperatura de 503 K. Enquanto que ambos os picos de fluxo de calor para o pistão e para o cabeçote diferem em cerca de 1,4 MW/m², para o cilindro esta diferença fica próxima a 1,0 MW/m².

A Figura 5.29 e a Figura 5.30 mostram os coeficientes de convecção médios para as paredes da câmara de combustão em função do ângulo de manivela, para temperaturas de

parede iguais a 403 e 503 K, respectivamente. O coeficiente de convecção médio é calculado através da razão entre o fluxo de calor para a parede em contato com o fluido e a diferença entre as temperaturas da parede e do fluido $[h = q_{parede} / (T_{parede} - T_{fluido})]$.

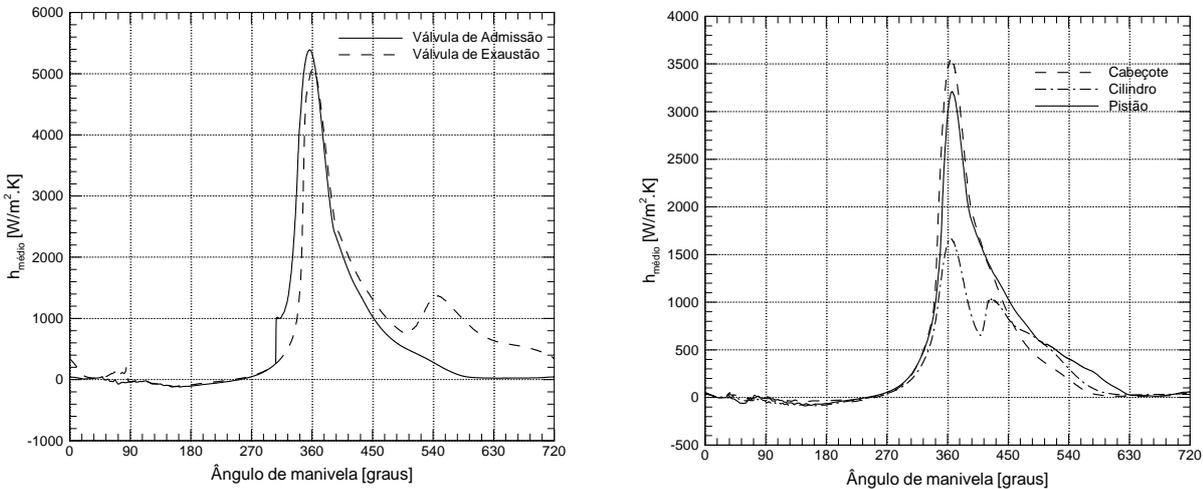


Figura 5.29 – Coeficientes de convecção médios em função do ângulo de manivela para a temperatura de parede igual a 403 K.

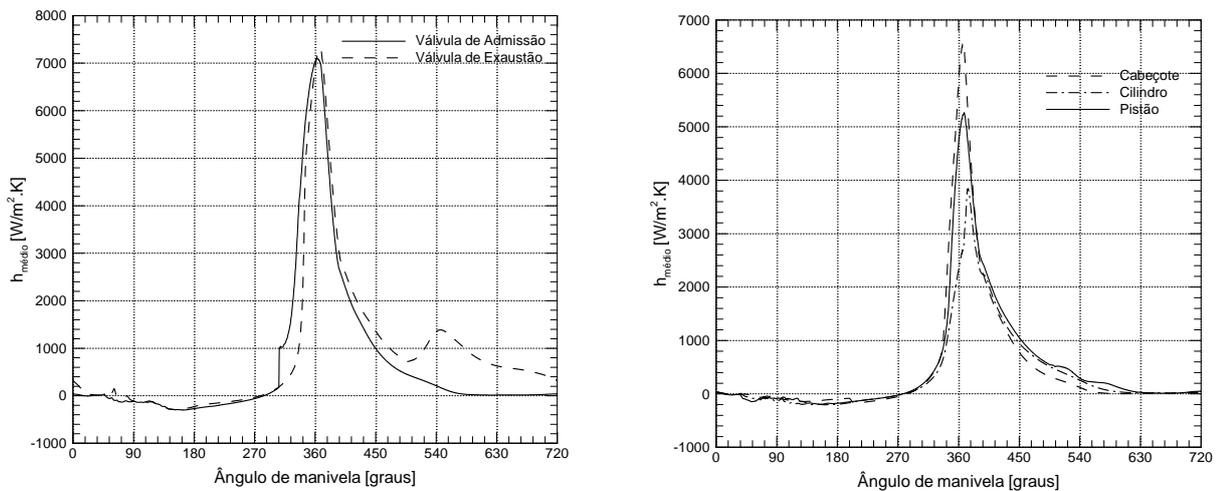


Figura 5.30 – Coeficientes de convecção médios em função do ângulo de manivela para a temperatura de parede igual a 503 K.

De forma análoga ao comportamento apresentado pelos fluxos de calor, os coeficientes de convecção médios nas paredes em ambas as condições de temperatura apresentam comportamento similar até o momento da ignição. A partir deste instante, a condição de temperatura de 503 K resulta em valores bem distintos para os valores dos coeficientes de convecção médios, em relação à outra condição.

Considerando a temperatura de parede de 403 K, verifica-se que os coeficientes de convecção de troca de calor para as válvulas de admissão e de exaustão apresentam valores de pico próximos a $5,5 \text{ kW/m}^2\text{K}$, enquanto, para a temperatura de 503 K, o coeficiente de troca de calor alcança $7,0 \text{ kW/m}^2\text{K}$. O mesmo comportamento se repete para os fluxos de calor para o cabeçote, cilindro e pistão. Por exemplo, o fluxo de calor para o pistão apresenta um pico em torno de $3,2 \text{ kW/m}^2\text{K}$ para a temperatura de parede de 403 K e de $5,2 \text{ kW/m}^2\text{K}$ para a temperatura de 503 K.

A diferença entre as taxas de reação para os dois casos simulados é evidenciada através dos gráficos da Figura 5.31 para a taxa média de destruição de oxigênio e para a taxa média de formação de dióxido de carbono em função do ângulo de manivela. Considerando a taxa de formação de dióxido de carbono como base para o cálculo da taxa de reação, o ângulo total de queima para a temperatura de parede igual a 403 K é de 107° , enquanto, para a temperatura de parede igual a 503 K, este ângulo é igual a 67° .

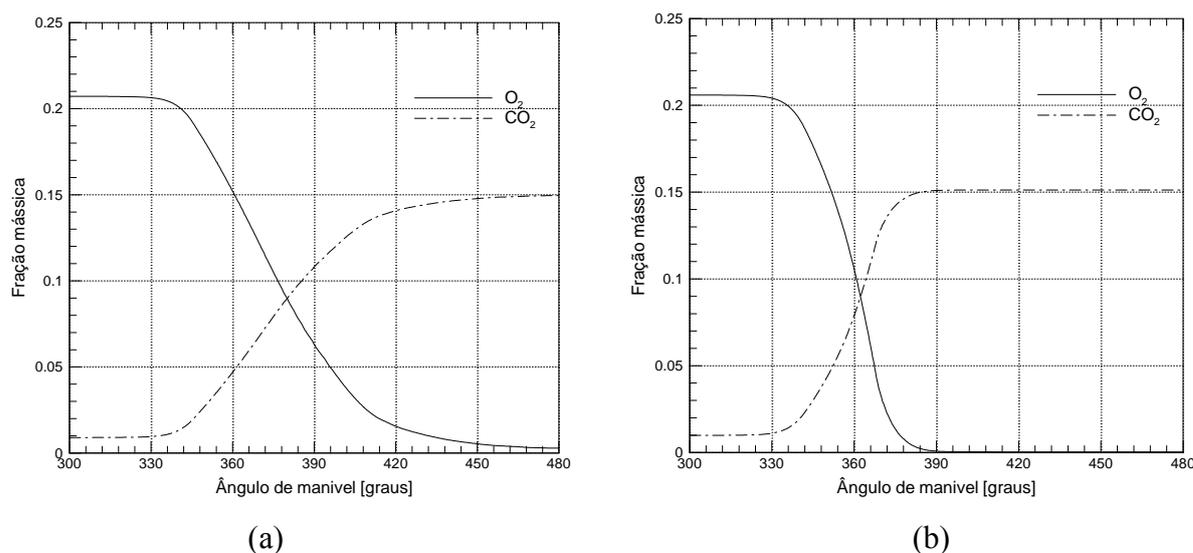


Figura 5.31 – Fração mássica média para o O_2 e o CO_2 em função do ângulo de manivela: (a) temperatura de parede igual a 403 K e (b) temperatura de parede igual a 503 K.

Assim, a partir de dados da performance do motor, da temperatura no interior do cilindro, das taxas de transferência de calor para as paredes da câmara de combustão, bem como das taxas de reação, verifica-se que a temperatura de parede é de grande importância nos resultados, necessitando de um cuidado especial na sua prescrição como condição de contorno no modelo numérico.

5.4.3 Efeito da composição da mistura ar/combustível

O efeito da composição da mistura ar/combustível é avaliado através da simulação de diferentes relações de equivalência. O modelo é resolvido para as condições apresentadas na Tabela 5.1, para uma velocidade de rotação de 4.500 rpm, temperatura de parede de 403 K, três diferentes avanços de ignição (48°, 54° e 60°) e três relações de equivalência (1,0, 1,1 e 1,2). Cada uma dessas relações de equivalência é simulada com três diferentes avanços de ignição.

Os parâmetros globais de desempenho obtidos para o motor simulado com as três razões relativas são apresentados na Tabela 5.6. A potência e a eficiência de conversão do combustível para as diferentes relações de equivalência e respectivos avanços de ignição simulados, conforme os resultados da Tabela 5.6, são apresentados graficamente na Figura 5.32.

Tabela 5.6 – Parâmetros de desempenho para as diferentes relações de equivalência.

λ	Avanço de ignição [°]	Eficiência volumétrica	Potência [kW]	Eficiência de conversão do combustível	Consumo específico de combustível [g/kWh]
1,0	48	0,74	12,55	0,33	219,96
	54	0,74	13,00	0,34	211,63
	60	0,74	10,87	0,28	252,29
1,1	48	0,75	10,83	0,31	232,74
	54	0,75	11,62	0,33	217,26
	60	0,74	12,42	0,35	202,88
1,2	48	0,75	8,66	0,27	267,98
	54	0,75	9,50	0,29	245,00
	60	0,75	10,59	0,33	219,66

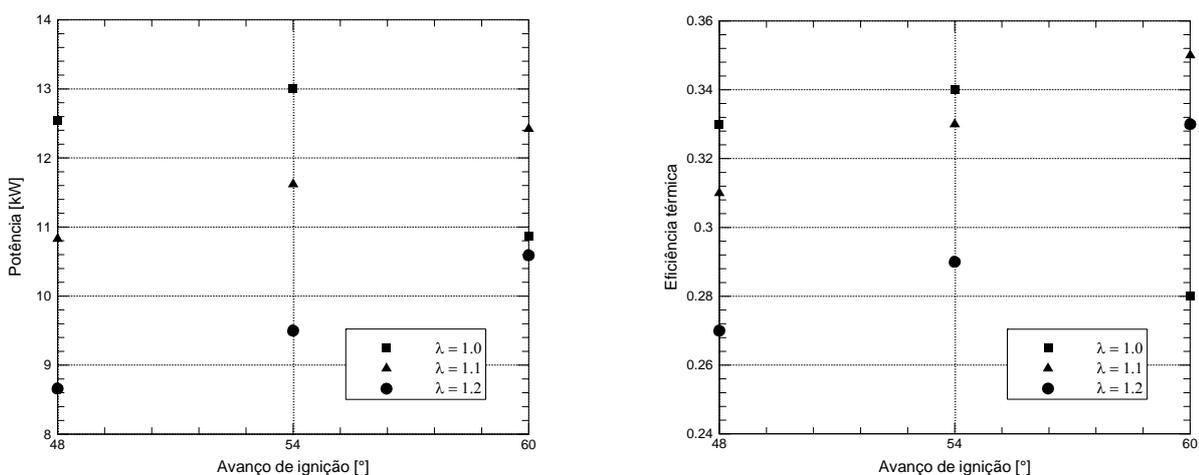


Figura 5.32 – Potência e eficiência de conversão do combustível em função do avanço de ignição.

Pelos valores apresentados na Tabela 5.6 é possível verificar a existência de um ponto ótimo de ignição (*MBT*) apenas para o caso com λ igual a 1,0. Para os outros dois casos, com λ iguais a 1,1 e 1,2, não é possível determinar a condição de ignição ótima somente com os avanços de ignição simulados. Para a determinação do *MBT*, a curva de potência deveria apresentar uma tendência de queda após o ponto ótimo de ignição, como é verificado para o caso com λ igual a 1,0. É possível verificar que à medida que o avanço de ignição aumenta, o motor ganha potência, diminui o consumo de combustível e, conseqüentemente, ganha em eficiência de conversão do combustível, com exceção do caso com λ igual a 1,0 e avanço de ignição igual a 60° , conforme discutido no item anterior. Para misturas pobres, a eficiência de conversão do combustível aumenta à medida que a relação de equivalência aumenta acima de 1,0.

A combustão de misturas mais pobres do que a mistura estequiométrica produz produtos com uma temperatura mais baixa (Heywood, 1988). Este fato pode ser evidenciado através da temperatura dos gases queimados, em função do ângulo de manivela, para diferentes relações de equivalência com avanço de ignição igual a 48° , conforme o gráfico da Figura 5.33. Até o momento da descarga pela válvula de exaustão, as misturas mais pobres apresentam menor temperatura para os gases queimados. Entretanto, após este instante, este comportamento se inverte e as misturas mais pobres passam a apresentar maior temperatura para os gases queimados.

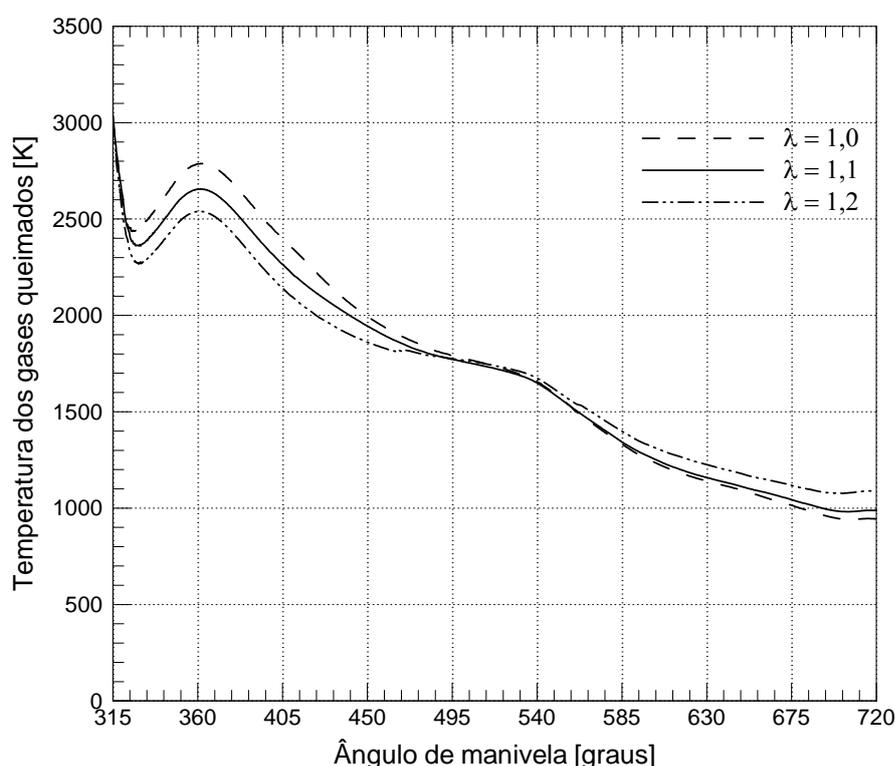


Figura 5.33 – Temperatura dos gases queimados em função do ângulo de manivela.

O aumento da temperatura dos gases queimados das misturas mais pobres durante a abertura da válvula de exaustão está ligado à maior taxa em que ocorre a combustão. Desta forma, como continua a ocorrer o processo de combustão em misturas mais pobres, mesmo após a abertura da válvula de exaustão, a temperatura dos gases queimados apresenta um valor superior à temperatura dos gases queimados para a mistura com λ igual a 1,0. Isto pode ser verificado através dos gráficos da Figura 5.34 para a taxa média de destruição de oxigênio e para a taxa média de formação de dióxido de carbono, em função do ângulo de manivela. Considerando a taxa de formação de dióxido de carbono como base para o cálculo da taxa de reação, o ângulo total de queima para a mistura com λ igual a 1,0 é de 108° , enquanto, para a mistura com λ igual a 1,1, é de 128° e, para λ igual a 1,2, o ângulo é de 162° .

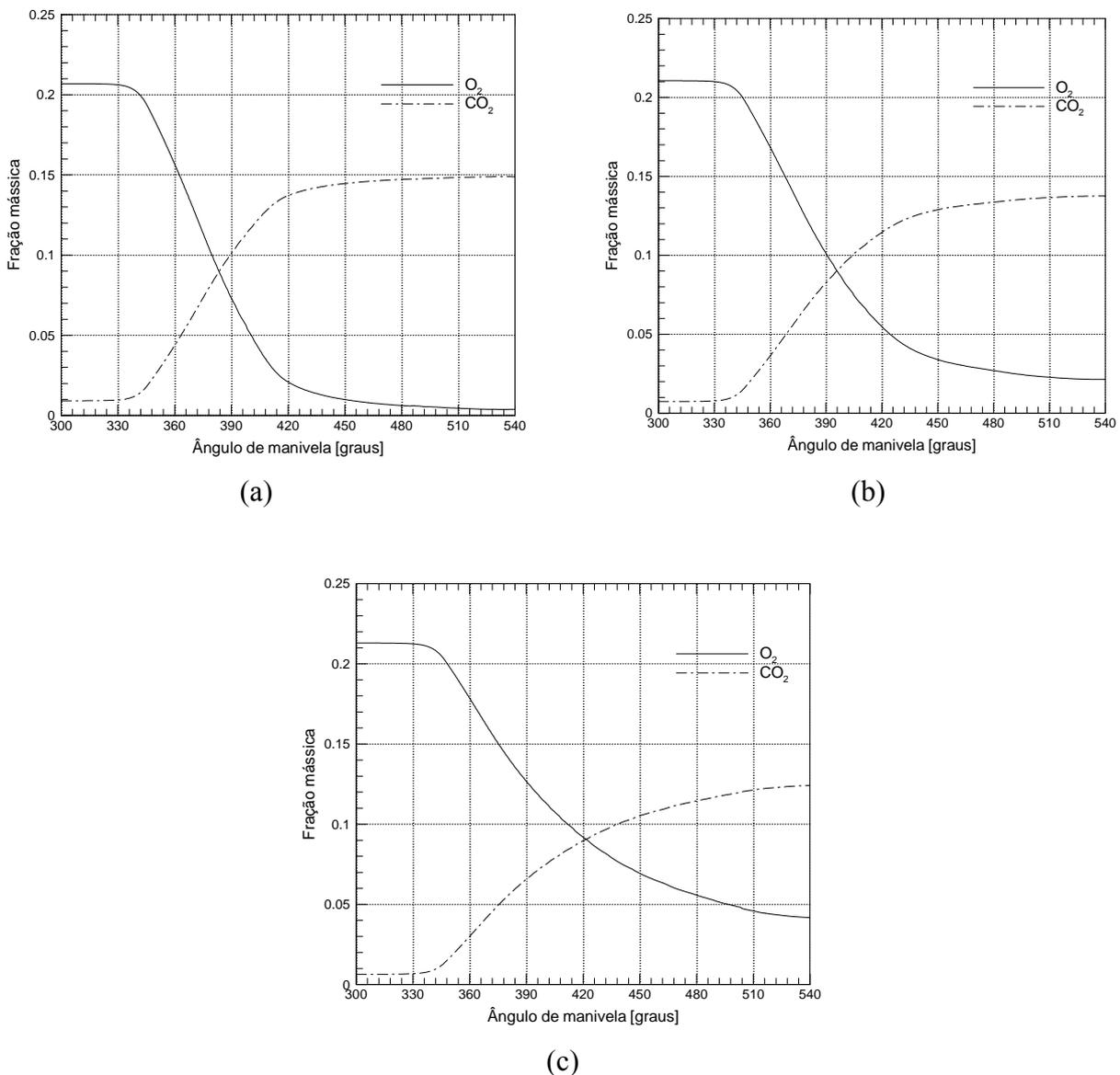
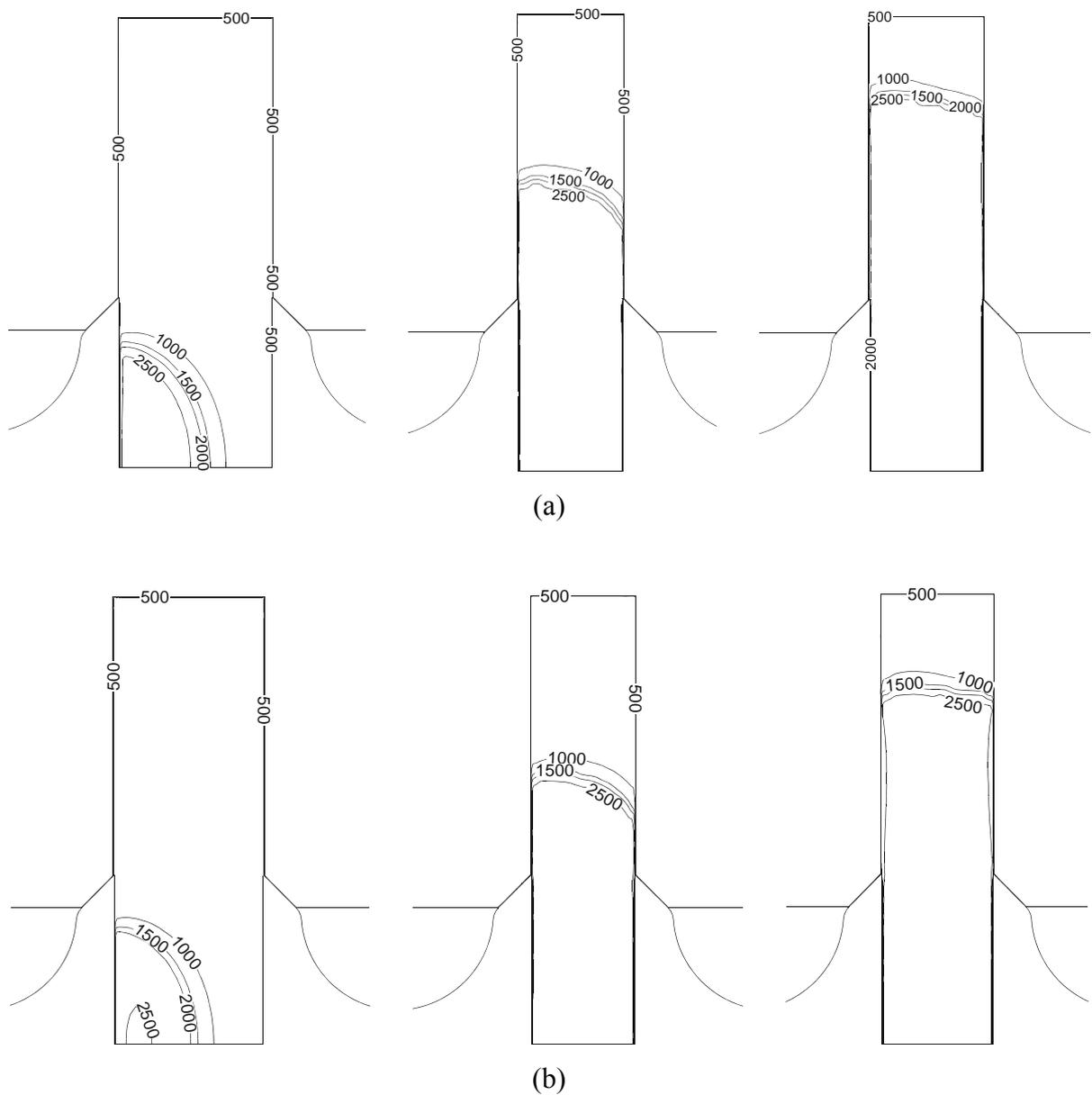


Figura 5.34 – Taxa de reação para o O_2 e o CO_2 em função do ângulo de manivela:

(a) λ igual a 1,0, (b) λ igual a 1,1 e (c) λ igual a 1,2.

A Figura 5.35 apresenta os contornos de temperatura para diferentes ângulos de manivela e, como realizado para a Figura 5.18, servem como base para o cálculo da velocidade de propagação da frente de chama. A velocidade média de propagação da frente de chama, considerando um intervalo de cerca de 54° , entre os ângulos de manivela iguais a 318° e 372° , é de cerca de 15,6 m/s para a mistura com $\lambda = 1,0$, 14,8 m/s para $\lambda = 1,1$, e 14,0 m/s para $\lambda = 1,2$. Os resultados comprovam o comportamento esperado para velocidades de propagação da frente de chama em misturas com diferentes valores de relação de equivalência, visto que à medida que a relação de equivalência aumenta as velocidades de propagação da frente de chama diminuem.



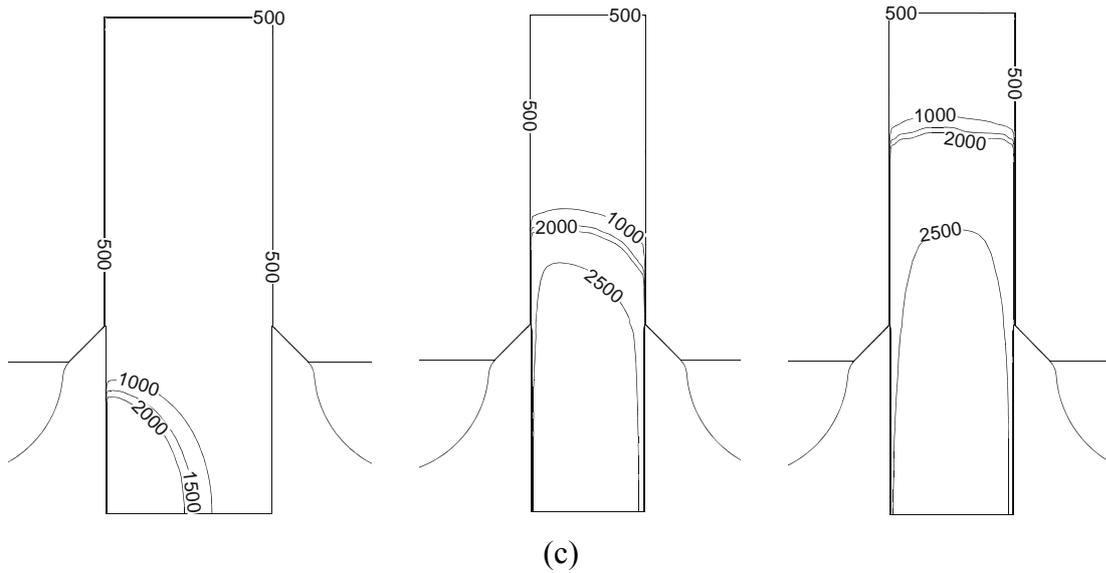


Figura 5.35 – Campos de temperatura [K] para três ângulos de manivela (336° , 354° e 372°) para três diferentes composições estequiométricas: (a) $\lambda = 1,0$, (b) $\lambda = 1,1$ e (c) $\lambda = 1,2$.

Neste trabalho foram realizadas simulações de um modelo de um motor à combustão interna a gás natural com o objetivo de avaliar os fenômenos físicos e químicos associados à dinâmica do escoamento, à combustão e à transferência de calor no interior da câmara de combustão. O trabalho se propôs, também, a analisar os efeitos de parâmetros de operação, como o avanço da centelha e a razão de equivalência da mistura reagente, além do efeito de hipóteses simplificativas, como a condição de contorno térmica nas paredes do cilindro.

Na definição do modelo utilizado, procurou-se otimizar o compromisso do tempo computacional associado à solução do modelo em relação à qualidade dos resultados gerados quando estes são comparados aos comportamentos observados ou a dados medidos especialmente para a validação. Nos momentos que antecederam a escolha deste modelo e durante a sua implementação, os seguintes aspectos foram cuidadosamente analisados:

- Quais simplificações em relação a um modelo 3-D seriam suficientes para garantir um menor custo computacional e a correta modelação dos fenômenos físicos e químicos?
- Qual geometria (dimensões do motor) deveria ser adotada? A análise seria mais completa com uma geometria simplificada ou com uma geometria mais complexa que pudesse ser comparada com medições?
- Qual combustível deveria ser adotado? Deveria ser adotado como combustível o gás natural, com todos ou com parte dos seus constituintes, exigindo o uso de uma cinética química detalhada e onerosa computacionalmente ou deveria ser adotado como combustível apenas um constituinte que pudesse representar as propriedades do gás natural e que permitisse um baixo custo computacional?
- Como deveria ser modelada a combustão e a interação entre a cinética química – turbulência? Deveria ser modelada com o uso de um modelo de chama correlacionada, de um modelo baseado em função G, ou do modelo EDC?
- Como seria modelada a ignição? Qual seria a quantidade de energia a ser depositada, por quanto tempo e em quê local da câmara de combustão?
- Qual o perfil de abertura e de fechamento deveria ser adotado para as válvulas? Como este perfil deveria ser aplicado à malha computacional?
- Quais as condições de contorno de pressões e temperatura levariam a uma menor oscilação da solução numérica?

A discussão destes tópicos levou à escolha do modelo adotado neste trabalho, que

pode ser sumarizado como segue. O modelo do motor a combustão interna naturalmente aspirado, com ignição por centelha e com admissão de gás metano e ar pré-misturados, foi simulado através de uma geometria bidimensional axissimétrica. Adotou-se um mecanismo de cinética química global para a reação química da combustão do gás metano, enquanto o modelo EDC foi o responsável pela interação entre a cinética química e a turbulência. A ignição foi modelada através da deposição de uma quantidade de energia prescrita, em um ponto próximo da válvula de admissão, para um intervalo de tempo também prescrito. Ambas as válvulas tiveram seus perfis de abertura e fechamento definidos com base em um polinômio de 9º grau. Foi prescrita uma temperatura uniforme para as paredes do interior da câmara de combustão, enquanto para a entrada do sistema de admissão e a saída do sistema de exaustão foram prescritas condições de pressão e temperatura. Finalmente, verificou-se que os resultados das simulações deste motor são coerentes com os dados medidos para motores que operam sob as mesmas condições, disponíveis na literatura. A seguir, detalham-se as principais conclusões fornecidas pelo modelo.

Os testes de refino de malha indicam que a variação do número de volumes da malha, com um maior ou um menor refino junto à parede, não altera significativamente os valores dos parâmetros globais de desempenho do motor.

Os resultados obtidos para a condição base de operação do motor indicam que o motor funciona adequadamente. As características do motor naturalmente aspirado, operando sob a condição de aceleração (válvula borboleta totalmente aberta), podem ser observadas através de gráficos preparados para os fluxos de massa na válvula de admissão e para a pressão no interior da câmara de combustão. Os gráficos para temperatura da mistura na admissão, auxiliados por resultados para a razão de admissão do oxigênio e do metano, reforçam a tese de que o motor aspira corretamente a mistura sob condições adequadas de pressão e temperatura.

Para a condição de operação adotada como referência na análise do problema, resultados para isoterms mostram que a frente de propagação de chama caracteriza como turbulenta a queima da mistura ar/combustível, tal como era esperado para um motor de combustão interna. Na comparação para diferentes pontos de ignição, o motor apresentou mais uma vez o comportamento esperado. A obtenção de uma curva de potência, com derivada nula para o avanço de ignição próximo aos 54°, é capaz de descrever o funcionamento do motor adequadamente para uma larga faixa de avanços de ignição.

A influência da condição da temperatura da parede da câmara de combustão foi também analisada através de uma comparação de ciclo-a-ciclo de operação do motor. Dependendo do avanço de ignição e da razão de equivalência, pode-se constatar que os

resultados de desempenho do motor são muito sensíveis ao valor da temperatura na parede da câmara de combustão. Desta forma, a correta modelagem deste parâmetro é de grande importância para a obtenção de dados precisos e coerentes na simulação numérica.

Por fim, a mudança da razão de equivalência do motor apresentou os resultados esperados para um motor com ignição por centelha. À medida que a razão de equivalência aumenta, a mistura torna-se mais diluída, a velocidade de propagação da chama, assim como a taxa de combustão diminuem e, então, o motor passa a exigir um maior avanço de ignição para que a potência seja mantida nos mesmos patamares de uma mistura próxima a razão de equivalência estequiométrica.

Conforme dito anteriormente, os resultados aqui obtidos para a simulação numérica são considerados adequados frente às limitações impostas pela geometria e pelos modelos adotados. Como sugestões para o aperfeiçoamento do modelo, sugerem-se as seguintes atividades em trabalhos futuros:

- Emprego de uma geometria tridimensional para uma melhor modelagem dos efeitos ligados à turbulência;
- Adoção de modelo de cinética química detalhado para uma caracterização mais detalhada dos eventos ligados à combustão;
- Inclusão de metodologia para a determinação da temperatura de parede ao longo de um ciclo de operação do motor e;
- Modelação da mistura ar/combustível que leve em conta não somente o uso de metano, mas também dos constituintes majoritários do gás natural, tais como o propano e o etano.

Como objetivo de longo prazo sugere-se o desenvolvimento e implementação de modelos de combustão que permitam uma seleção dinâmica local da complexidade do mecanismo químico a ser utilizado. Nota-se que durante o ciclo, uma fração expressiva da mistura gasosa permanece em estado de quase-equilíbrio e nestas regiões não há a necessidade de um modelo cinético detalhado, enquanto que na região da frente de combustão, um modelo cinético detalhado é imprescindível para a correta definição da estrutura da chama.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANP – AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO. **Anuário Estatístico Brasileiro do Petróleo e do Gás Natural**. Rio de Janeiro, 2006.

ARCOUMANIS, C., WHITELAW, J. H. **Fluid mechanics of internal combustion engines: a review**. In International Symposium on Flows in Internal Combustion Engines – III. ASME, New York, 1985.

ARRHENIUS, S. **On the reaction rate of the inversion of non-refined sugar upon souring**. Zeitschrift für Physikalische Chemie, Vol. 4, pp. 226-248, 1889.

ASLAM, M. U., MASJUKI, H. H., KALAM, M. A., ABDESSELAM, H., MAHLIA, T. M. I., AMALINA, M. A. **An experimental investigation of CNG as an alternative fuel for retrofitted gasoline vehicle**. Fuel, Vol. 85, pp. 717-724, 2006.

BARTH, T. J., JESPERSEN, D. **The design and application of upwind schemes on unstructured meshes**. Technical Report AIAA-89-0366, AIAA 27th Aerospace Sciences Meeting, Reno, Nevada, 1989.

BIRD R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N. **Transport Phenomena**. New York: J. Wiley & Sons, 1960.

BOUSSINESQ, J. **Essai sur la théorie des aux courantes**. Mem. Présentés Acad. Sci., Vol. 23, 1877

CAILLOL, C., DELORME, T., DENIS, P., BERARDI, G. **A combustion model for analyzing the effects of natural gas composition on the operation of a spark ignition engine**. SAE paper 2002-01-2236, 2002.

CARTELLIERI, W., CHMELA, F. G., KAPUS, P. E., TATSCHL, R. M. **Mechanisms leading to stable and efficient combustion in lean burn gas engines**. International Symposium COMODIA 94, 1994.

DAS, L. M., GULARTI, R., GUPT, P. K. **A comparative evaluation of the performance characteristics of a spark ignition engine using hydrogen and compressed natural gas as alternative fuels.** Internal Journal of Hydrogen Energy, Vol. 25, pp. 783-793, 2000.

DESCHAMPS, C.J. **Modelos Algébricos e Diferenciais.** In: Turbulência: Anais da I Escola de Primavera em Transição e Turbulência, pp. 101-142, Rio de Janeiro, 1998.

FAVRE, A. **Équations des gaz turbulents compressibles. I – Forms généraux.** Journal de Mécanique, Vol. 4, pp. 361-390, 1965.

FLUENT INC. **Fluent 6.3.26.** USA, 2006.

FYHR, C., DAHLBERG, O. **Complete engine modeling using CFD.** SAE paper 2004-01-0109, 2004.

GASNET. O site do gás natural – GNV. Seções: gás natural e gás natural veicular. Disponível em: < http://www.gasnet.com.br/novo_gas_natural.asp>. Acesso em: 20 agosto 2007.

GOSMAN, A. D. **Computational fluid dynamics in the automobile.** Imperial College of Science and Technology, 1988.

HEYWOOD, J. B. **Fluid motion within the cylinder of internal combustion engines – The 1986 freeman scholar lecture.** Journal of Fluids Engineering (ASME), Vol. 109, 1987.

HEYWOOD, J. B. **Internal Combustion Engine Fundamentals.** New York: McGraw-Hill Inc, 1988.

HUTCHINSON, B. R., RAITHBY, G. D. **A multigrid method based on the additive correction strategy.** Numerical Heat Transfer, Vol. 9, pp. 511-537, 1986.

JAYATILLEKE, C. L. V. **The influence of Prandtl number and surface roughness on the resistance of the laminar sublayer to momentum and heat transfer.** Progress in Heat and Mass Transfer, Vol. 1, pp. 193-329, 1969.

JOHANSSON, B., OLSSON, K. **Combustion chambers for natural gas SI engines Part 1: Fluid flow and combustion.** SAE paper 950469, 1995.

KATO, K., IGARASHI, K., MASUDA, M., OTSUBO, K., YASUDA, A., TAKEDA, K., SATO, T. **Development of engine for natural gas vehicle.** SAE paper 1999-01-0574, 1999.

LAUNDER, B. E., SPALDING, D. B. **Lectures in mathematical models of turbulence.** Academic Press, London, England, 1972.

LIPATNIKOV, A. N., CHOMIAK, J. **Turbulent flame speed and thickness: phenomenology, evaluation, and application in multidimensional simulation.** Prog. Energy Combust. Sci., Vol 28, pp. 1-74, 2002.

MAGNUSSEN, B. F., HJERTAGER, B. J. **On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion.** 16th Symp. (Int.) on Combustion, pp. 719-729, 1976.

MAGNUSSEN, B. F. **On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow.** 19th AIAA Aerospace Science Meeting, Jan. 12-15, St.Louis, Missouri, 1981.

MAGNUSSEN, B. F. **Modeling of NO_x and soot formation by the eddy dissipation concept.** Int. Flame Research Foundation, 1st topic Oriented Technical Meeting. 17-19 Oct, Amsterdam, Holland, 1989.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional.** Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2004.

MCBRIDE, B. J., ZEHE, M. J., GORDON, S. **NASA Glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species.** NASA/TP--2002-211556, 2002.

NASER, J. **Private communication.** 1988.

OLSSON, K., JOHANSSON, B. **Combustion chambers for natural gas si engines part 2: combustion and emissions.** SAE paper 950517, 1995.

ORSZAG, S. A., YAKHOT, V., FLANNERY, W. S., BOYSAN, F., CHOUHURY, D., MARUZEWSKI, J., PATEL, B. **Renormalization group modeling and turbulence simulations.** In: So, R.M.C., Speziale, C.G., & Launder, B.E., Near-Wall turbulent flows. Elsevier Science Publisher, 1993.

PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow.** New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

PETERS, N. **Turbulent Combustion.** Cambridge University Press, Cambridge, 2000.

POINSOT, T., VEYNANT, D. **Theoretical and Numerical Combustion.** Philadelphia: Edwards, 2001.

REYNOLDS, O. **On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion.** Phil Trans. Roy. Soc. London Ser. A, 1895.

SARKAR, S., BALAKRISHNAN, L. **Application of a reynolds-stress turbulence model to the compressible shear layer.** ICASE Report 90-18, NASA CR 182002, 1990.

TAN, Z., REITZ, R. D. **An ignition and combustion model based on the level-set method for spark ignition engine multidimensional modeling.** Combustion and Flame, Vol. 145, Issue 1-2, pp. 1-15, 2006.

THOBOIS, L., LAUVERGNE, R., GIMBRES, D., LENDRESSE, Y. **The analysis of natural gas engine combustion specificities in comparison with isoctane through CFD computation.** SAE paper 2003-01-0009, 2003.

TINAUT, F. V., MELGAR, A., HORRILLO, A., DE LA ROSA, A. D. **Method for predicting the performance of an internal combustion engine fuelled by producer gas and other low heating value gases.** Fuel Processing Technology, Vol. 87, pp. 135-142, 2006.

VERSTEEG, H. K., MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics.** New York: Longman Scientific & Technical, 1995.

WARNATZ, J., MAAS, U., DIBBLE, R. W. **Combustion: physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation.** Berlin, Heidelberg, New York, Barcelona, Hong Kong, London, Milan, Paris, Singapore, Tokyo: Springer, 2001.

WESTBROOK, C. K., MIZOBUCHI, Y., POINSOT, T. J., SMITH, P. J., WARNATZ, J. **Computational combustion.** Proceedings of the Combustion Institute, pp. 125-157, 2005.

ZHANG, D., FRANKEL, S. H. **A numerical study of natural gas combustion in a lean burn engine.** Fuel, Vol. 77, pp. 1339-1347, 1998.