

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

ANÁLISE NUMÉRICA E EXPERIMENTAL DA COMBUSTÃO DE METANO EM
MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA ALTERNATIVOS

por

Flavio Vanderlei Zancanaro Júnior

Tese de Doutorado

Porto Alegre, agosto 2014

ANÁLISE NUMÉRICA E EXPERIMENTAL DA COMBUSTÃO DE METANO EM
MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA ALTERNATIVOS

por

Flavio Vanderlei Zancanaro Júnior
Mestre em Engenharia Mecânica

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Horácio Antonio Vielmo

Aprovada por:

Prof. Dr. Mario E. S. Martins UFSM

Prof. Dr. Cristiano Vitorino da Silva URI / Erechim

Prof. Dr. Fernando M. Pereira PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Rogério José Marczak
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 29 Agosto de 2014

*Ao meu filhão Luiz Othavio,
à minha mãe, pai, irmãos e esposa,
com muito amor e carinho.*

A Deus meu muito obrigado!

AGRADECIMENTOS

Primeiramente gostaria de agradecer ao meu filho Luiz Othavio, aos meus pais, Flavio e Ivania, e irmãos, Fabio e Fagner pelo constante apoio e incentivo durante toda a minha vida acadêmica.

Ao Professor Horácio Antonio Vielmo, pela orientação, confiança e por disponibilizar um ambiente adequado para o desenvolvimento do trabalho; sobre cuja orientação reitero a honra e privilégio de ter trabalhado.

A todos os professores e colegas do departamento, que ajudaram na conclusão deste trabalho. Em especial aos amigos do GESTE e laboratório de motores, Charles Rech, Bruno Soriano, Carlos Falcã e João Akwa pelo incentivo em dias difíceis.

Ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica desta Universidade por todo apoio e por disponibilizar um ambiente adequado para realização deste trabalho.

Ao CNPq que me contemplou com bolsa de estudos totalizando dois anos de financiamento que foi fundamental para minha estada em Porto Alegre neste período.

Ao CESUP/UFRGS por disponibilizar o recurso computacional.

Por fim, um agradecimento especial a minha esposa Ellen Machado Contreira Zancanaro, que além da compreensão e carinho, assumiu todas as minhas responsabilidades como pai para que eu pudesse me dedicar à confecção do presente trabalho, obrigado.

RESUMO

Desde o seu surgimento o motor de combustão interna é a alternativa de fornecimento de potência mais utilizada no mundo em veículos de passeio e transporte de cargas. De fato, observa-se no dia-a-dia uma forte dependência da utilização de motores e, atualmente, os estudos visando o seu aumento de eficiência e a diminuição de emissões poluentes estão cada vez mais intensos. Com os grandes avanços ocorridos na disponibilização de computadores, existe uma tendência contínua para a utilização de técnicas computacionais auxiliando no projeto de motores. No entanto, o maior desafio é simular o escoamento altamente tridimensional, turbulento e transiente, com o uso de modelos de turbulência e combustão, que tenham bom compromisso com a física envolvida. Neste âmbito, o presente trabalho tem o objetivo de desenvolver uma validação de metodologias numérica e experimental, para avaliar o comportamento dinâmico e reativo do escoamento em motores de combustão interna. A simulação é aplicada a um motor Honda GX35, que possui vasto uso comercial em roçadeiras, motocicletas de baixo custo e, atualmente, em Veículos Autônomos Não Tripulados (VANT), dentre outros. A análise tem como base soluções numéricas pelo método dos volumes finitos, usando o programa comercial Star-cd/es-ice. Para resolver o escoamento turbulento o modelo adotado foi o $k-\omega$ SST, com aproximação para baixo Reynolds e tratamento de parede híbrido. O modelo de combustão ECFM-3Z foi empregado para resolver o escoamento reativo. O combustível utilizado foi metano em mistura estequiométrica. Os resultados numéricos são confrontados com resultados experimentais, com o objetivo de examinar o estado da arte dessas metodologias. Valores transientes de pressão no interior do cilindro, vazão mássica de ar, fração mássica queimada, em relação ao eixo de manivelas e os produtos da combustão são confrontados. A presença de recirculações na admissão e no cilindro foram detectadas e discutidas. As evoluções da pressão interna no cilindro e da vazão mássica de ar resultantes da simulação numérica apresentaram um bom comportamento, quando confrontado com dados experimentais. Os resultados da fração mássica de combustível queimado revelam características importantes de funcionamento do motor.

Palavras-chave: Ciclo Otto, CFD, malha móvel, turbulência, combustão, simulação numérico-experimental

ABSTRACT

Since its inception, the internal combustion engine is the alternative of delivering power most used worldwide in passenger vehicles and transportation. Indeed, it is observed in day-to-day a strong dependency on the use of engines, and currently studies aiming at its increased efficiency and reduced emissions are becoming more intense. With the great advances in the availability of computers, there is a continuing trend towards the use of computational techniques aiding in the engine designs. However, the main challenge is to simulate the highly three-dimensional, transient and turbulent flows with the turbulence and combustion models, which have good compromise with the involved physics. In this context, this work aims to develop a validation of numerical and experimental methods for evaluating the dynamic and reactive behavior of the flow in internal combustion engines. The simulation is applied to a Honda GX35 engine, which has commercial application in brushcutters, motorcycles of low cost, Unmanned Autonomous Vehicles (UAV), among others. The analysis is based on numerical solutions by the finite volume method, using the commercial software Star-CD / es-ice. To solve the turbulent flow the model adopted was the $k-\omega$ SST, in its Low Reynolds approach with hybrid treatment near the walls. The ECFM-3Z combustion model was employed to solve the reactive flow. The fuel used was methane in the stoichiometric mixture. The numerical results are compared with experimental ones, in order to examine the state of art of these methodologies. Transient values of cylinder inside pressure, mass air flow, mass fraction of the fuel burned, in relation to the crankshaft angle and the combustion products are confronted. The presence of recirculation in the intake duct and cylinder were detected and discussed. The evolutions of the internal cylinder pressure and mass flow rate of air showed a good behavior, when confronted with experimental data. The results of the burned mass fraction reveal important characteristics of engine operation.

Keywords: Otto cycle, CFD, moving mesh, turbulence, combustion, experimental-numerical simulation.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	DADOS DO PROBLEMA	3
1.1.1	Ciclo de Operação	4
1.1.2	Características do Motor	5
1.1.3	Propriedades Termofísicas	6
1.2	MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS DO TRABALHO	7
1.3	ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO	7
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	9
3	MODELAGEM DO ESCOAMENTO TURBULENTO E REATIVO	16
3.1	EQUAÇÕES MÉDIAS DE REYNOLDS	17
3.1.1	Decomposição de Reynolds	18
3.1.2	Conservação de Massa	20
3.1.3	Transporte da Quantidade de Movimento	20
3.1.4	Conservação de Energia	22
3.1.5	– Conservação de Espécies Químicas	25
3.2	MODELAGEM DA TURBULÊNCIA - RANS	26
3.2.1	Modelos de Viscosidade Turbulenta - EVM	26
3.2.1.1	Modelos EVM de Duas Equações	28
3.2.1.1.1	Modelo $k-\omega$ SST	28
3.3	APROXIMAÇÃO DE BAIXO NÚMERO DE REYNOLDS	31
3.4	CONDIÇÃO DE CONTORNO DO ESCOAMENTO TURBULENTO	33
3.4.1	Condição de Contorno na Parede	33
3.4.1.1	Condição de Contorno na Parede com Tratamento Padrão - Aproximação de Baixo Número de Reynolds	34
3.4.1.2	Condição de Contorno na Parede com Tratamento Híbrido	35
3.4.2	Condição de Contorno de Entrada	36
3.5	MODELOS DE COMBUSTÃO PARA MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA	36
3.5.1	Modelo CFM-ITNFS	39
3.5.1.1	Tratamento da Ignição	42
3.5.2	Modelos de Combustão Avançados	44

3.5.2.1	Modelo ECFM-3Z	45
3.5.2.1.1	Evolução de (Z, \tilde{c}) durante a Combustão	47
3.5.2.1.2	Modelo de Mistura	48
3.5.2.1.3	Modelo de Ignição	50
3.5.2.1.4	Modelo de Propagação da Chama	51
3.5.2.1.5	Modelo de Pós-Chama e Emissões	53
3.6	FRAÇÃO MÁSSICA QUEIMADA.....	55
4	METODOLOGIA NUMÉRICA	58
4.1	ETAPAS DA SOLUÇÃO NUMÉRICA.....	58
4.2	PROPRIEDADES DO MÉTODO NUMÉRICO	59
4.2.1	Consistência.....	59
4.2.2	Estabilidade	61
4.2.3	Convergência.....	61
4.3	DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES PELO MÉTODO DE VOLUMES FINITOS	62
4.3.1	Método dos Volumes Finitos (MVF)	62
4.3.2	Esquemas de Discretização no Espaço – Funções de Interpolação.....	63
4.3.2.1	Esquema de Diferença Central - CD	64
4.3.2.2	Esquema de Diferenças Upwind - UD	65
4.3.2.3	Esquema de Diferenças Upwind Linear - LUD.....	66
4.3.2.4	Esquema <i>Blended Differencing</i> - BD	67
4.3.3	Esquema de Discretização Temporal	67
4.4	EQUAÇÕES FINAIS DO MÉTODO DE VOLUMES FINITOS.....	68
4.5	ACOPLAMENTO PRESSÃO-VELOCIDADE	69
4.5.1	Algoritmo PISO.....	69
4.5.1.1	Sequência de Passos da Solução.....	71
4.6	CONDIÇÕES DE CONTORNO.....	73
5	MODELAGEM NUMÉRICA E EXPERIMENTAL.....	75
5.1	PROCEDIMENTO NUMÉRICO - METODOLOGIA DO <i>ES-ICE</i>	75
5.2	PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL	83
5.2.1	Medição da Vazão Mássica	83
5.2.1.1	Diferenças Geométricas entre os Coletores de Admissão Simulado Numericamente e Ensaiado Experimentalmente.....	84

5.2.2	Aquisição de Dados	84
5.2.3	Medição da Posição Angular	85
5.2.4	Determinação do Ponto Morto Superior Geométrico	86
5.2.5	Sensor de Pressão	87
5.2.6	Relação Ar-Combustível	88
5.2.7	Sistema de Injeção Eletrônica	89
5.2.8	Análise dos Gases de Exaustão	90
5.2.9	Programa de Aquisição e Tratamento dos Dados	91
5.2.10	Incerteza da Medição da Vazão Mássica de Ar	91
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES	93
6.1	VALIDAÇÃO DA METODOLOGIA	94
6.1.1	Características do Escoamento e Vazão Mássica de Ar	95
6.1.2	Campos de Pressão	101
6.1.3	Fração Mássica Queimada (FMQ)	104
6.1.4	Análise dos Gases	106
6.2	RESULTADOS ADICIONAIS	107
6.2.1	Campos de Temperatura	107
6.2.2	Fração Mássica de CH ₄	109
7	CONCLUSÕES	112
7.1	PROPOSTAS PARA CONTINUIDADE DO TRABALHO	113
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	115
	APÊNDICE A	127
	ANEXO A	128
A.1	DINÂMICA DOS GASES NO PROCESSO DE ADMISSÃO	128
A.1.1	Razões de <i>Tumble</i> e <i>Swirl</i>	129
	ANEXO B	131
	ANEXO C	133

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1 – Perspectiva de crescimento da população mundial [adaptado de <i>Population Division United States Census Bureau International Database</i> , 2014]	1
Figura 1.2 – Perspectiva de consumo de energia nos próximos anos [adaptado de EIA, 2012].	2
Figura 1.3 - Ciclo de operação Otto: (a) admissão; (b) compressão; (c) expansão; (d) exaustão [adaptado de Heywood, 1988].	4
Figura 1.4 - Motor monocilíndrico Honda GX35 [Honda, 2012].	5
Figura 2.1 – Resultados dos erros para CO e NO [Bougrine <i>et al.</i> , 2011].	13
Figura 2.2 – Tempo de processamento [adaptado de Velghe <i>et al.</i> , 2011].	14
Figura 3.1 - Componentes das velocidades instantânea, média temporal e flutuação: (a) escoamentos em que u não depende do tempo; (b) situação onde u depende do tempo [adaptado de Bird <i>et al.</i> , 2004].	19
Figura 3.2 - Ilustração da célula próxima à parede [Star-cd, 2014a].	35
Figura 3.3 – Diagrama de regimes para a combustão turbulenta pré-misturada	37
Figura 3.4 – Esquema da representação na célula computacional [modificado de Colin e Benkenida, 2004].	46
Figura 3.5 – Evolução da combustão pré-misturada [Colin e Benkenida, 2004].	47
Figura 3.6 – Curva característica da FMQ em função do eixo de manivelas	56
Figura 4.1 - Volume de controle para uma situação bidimensional [Patankar, 1980]	63
Figura 4.2 - Variação com o número de Peclet [Maliska, 2004]	66
Figura 4.3 - Esquema de discretização temporal – Euler totalmente implícito [Star-cd, 2014a]	68
Figura 4.4 – Implementação do algoritmo PISO [Star-cd, 2014a].	70
Figura 5.1 – Geometria do HONDA GX35 importada do programa CAD.	76
Figura 5.2 – Distribuição das células na região da ignição	77
Figura 5.3 – Distribuição das células radiais ao redor das válvulas	78
Figura 5.4 – Distribuição das células no cilindro: (a) PMS; (b) PMI.	78
Figura 5.5 - Vista isométrica da malha hexaédrica <i>trimmed</i> .	79
Figura 5.6 – Implementação das condições de contorno.	80
Figura 5.7 – Mapa de abertura e fechamento das válvulas	81
Figura 5.8 – Especificações técnicas da estação de trabalho.	82
Figura 5.9 – Diagrama esquemático da montagem experimental com combustão.	83
Figura 5.10 – Diagrama esquemático da calibração do MAF [Rech, 2010].	84

Figura 5.11 – Canal de admissão experimental.	85
Figura 5.12 – <i>Encoder</i> incremental.	85
Figura 5.13 – Instrumento de medição (a) relógio comparador, (b) sensor <i>Hall</i> .	86
Figura 5.14 – Instruções para adaptação do sensor de pressão [Optrand Incorporated, 2014].	87
Figura 5.15 – Adaptação do sensor de pressão (a) vista externa, (b) vista interna.	88
Figura 5.16 – Sensor de oxigênio de banda larga (a) Sonda de oxigênio, (b) WB-O ₂ Datalogger [Bosh Motorsport, 2014 ; Fueltech WB-O ₂ Datalogger, 2014].	89
Figura 5.17 – Analisador de gases [NAPRO Eletrônica Industrial Ltda, 2012].	90
Figura 6.1 – Cortes (a) A-A, (b) B-B.	93
Figura 6.2 – Rotação experimental.	94
Figura 6.3 – Lambda experimental.	95
Figura 6.4 – Campo vetorial da velocidade em 75° após PMS, no corte A-A.	96
Figura 6.5 – Campo vetorial da velocidade em torno da haste em 75° após PMS	97
Figura 6.6 – Campo vetorial da velocidade a 75° após PMS.	98
Figura 6.7 – Vazão mássica de ar na admissão.	100
Figura 6.8 – <i>Tumble x</i> , <i>tumble y</i> e <i>swirl z</i> .	100
Figura 6.9 – Campo de pressão absoluta em 75° após PMS.	101
Figura 6.10 – Campo de pressão no corte B-B a 75° após PMS (a) vista normal ao plano <i>x</i> , (b) vista isométrica.	102
Figura 6.11 – Evolução da pressão absoluta no ciclo.	103
Figura 6.12 – Diagrama <i>P-V</i> .	104
Figura 6.13 – Fração Mássica Queimada.	105
Figura 6.14 – Campos de temperatura numéricos para o corte B-B.	108
Figura 6.15 – Evolução do campos de temperatura numéricos.	109
Figura 6.16 – Campos da fração mássica de CH ₄ para o corte B-B.	110
Figura 6.17 – Evolução da fração mássica de CH ₄ .	111
Figura A.1 - Configurações utilizadas para geradores de <i>swirl</i> : (a) válvula com defletor; (b) coletor de entrada direta; (c) coletor helicoidal [Pulkrabek, 1997].	129
Figura C.1 – Calibração do analisador de gases.	133

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1.1 - Características do motor Honda GX35.	6
Tabela 1.2 - Propriedades do ar.	6
Tabela 1.3 - Propriedades do metano.	6
Tabela 3.1 - Coeficientes do conjunto $C_{\phi 1}$ para o modelo $k-\omega$ SST.	29
Tabela 3.2 - Coeficientes do conjunto $C_{\phi 2}$ para o modelo $k-\omega$ SST.	29
Tabela 3.3 - Coeficientes do modelo $k-\varepsilon$ e $k-\omega$.	33
Tabela 3.4 - Coeficientes em relação aos combustíveis	40
Tabela 6.1 – Fração de mássica queimada em relação ao ângulo do eixo de manivelas.	105
Tabela 6.2 – Valores das porcentagem em volume das espécies na exaustão.	107
Tabela A.1 – Cálculo da porcentagem de volume das espécies na exaustão	127

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

BD	<i>Blended Differencing</i>
CAD	<i>Computer Aid Design</i>
CD	<i>Central Differencing</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CFM	<i>Coherent Flame Model</i>
CO ₂	Dióxido de Carbono
CO	Monóxido de Carbono
CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
ECFM	<i>Extended Coherent Flame Model</i>
ECFM-3Z	<i>Extended Coherent Flame Model – 3 Zones</i>
EDP	Equação Diferencial Parcial
EGR	<i>Exhaust Gas Recirculation</i>
EIA	<i>Energy Information Administration</i>
ES-ICE	<i>Expert System – Internal Combustion Engine</i>
EVM	<i>Eddy Viscosity Models</i>
EVO	<i>Exhaust Valve Open</i>
FFM	<i>Fractal Flame Model</i>
FMQ	Fração Mássica Queimada
FSD	<i>Flame Surface Density</i>
GDI	<i>Gasoline Direct Injection</i>
HC	Hidrocarbonetos
HCCI	<i>Homogeneous Charge Compression Ignition</i>
ICE	<i>Internal Combustion Engine</i>
ITNFS	<i>Intermittent Turbulent Net Flame Stretch</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
LDA	<i>Laser Doppler Anemometry</i>
LI-CFM	<i>Laminar Ignition - Coherent Flame Model</i>
LIF	<i>Laser Induced Fluorescence</i>
LUD	<i>Linear Upwind Differencing</i>
MAF	<i>Measurement Air Flow</i>
NO	Óxido de Nitrogênio

NO ₂	Dióxido de Nitrogênio
PDF	<i>Probability Density Function</i>
PISO	<i>Pressure Implicit Splitting of Operators</i>
PMI	Ponto Morto Inferior
PMS	Ponto Morto Superior
O ₂	Oxigênio
ONUBR	Nações Unidas no Brasil
RANS	<i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>
RPM	Rotações por minuto
RSM	<i>Reynolds Stress Models</i>
SIMPLE	<i>Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations</i>
SST	<i>Shear Stress Transport</i>
UD	<i>Upwind Differencing</i>
URANS	<i>Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>
VANT	Veículos Autônomos Não Tripulados

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Romanas

a	Coeficiente da função de Wiebe
A	Variável qualquer
A_f	Área da superfície da chama, m ²
A_k	Área do Kernel, m ²
A_{kl}	Área do Kernel para o estiramento laminar, m ²
$A1_{igni}$	Parâmetro de ajuste do modelo de ignição
$A2_{igni}$	Parâmetro de ajuste do modelo de ignição
$a1$	Constante do modelo $k-\omega$ SST
b	Variável de regressão
B	Diâmetro do cilindro, m
B	Variável qualquer
\tilde{c}	Variável de progressão
c	Variável de progressão através das médias de Reynolds
C	Fator de correção do modelo ECFM-3Z
C_{conv}	Constante do modelo ECFM-3Z
C_x	Razão de coeficientes na zona não misturada
$CD_{K\omega}$	Constante do modelo $k-\omega$ SST
\bar{c}_p	Calor específico médio a pressão constante na temperatura T , J/kg·K
c_p^0	Calor específico de referência a temperatura T_0 , J/kg·K
C_μ	Coeficiente empírico relacionado ao modelo de turbulência
$C_{\varepsilon1}$	Coeficiente empírico relacionado a equação da taxa de dissipação
$C_{\varepsilon2}$	Coeficiente empírico relacionado à equação da taxa de dissipação
$C_{\varepsilon3}$	Coeficiente empírico relacionado à equação da taxa de dissipação
$C_{\varepsilon4}$	Coeficiente empírico relacionado à equação da taxa de dissipação
C_ϕ	Coeficiente empírico relacionado ao modelo $k-\omega$ SST
$C_{\phi1}$	Coeficiente empírico relacionado ao modelo $k-\omega$ SST
$C_{\phi2}$	Coeficiente empírico relacionado ao modelo $k-\omega$ SST
d	Diâmetro da válvula, m

D	Difusividade térmica
\tilde{D}_m	Difusividade molecular da espécie m
\tilde{D}_m^T	Coefficiente de difusão térmica da espécie m
D_{ht}	Difusividade térmica turbulenta
D_{querat}	Parâmetro do modelo ECFM-3Z
E	Coefficiente constante
f_μ	Função de amortecimento
F_1	Função de combinação do modelo $k-\omega$ SST
F_2	Função de combinação do modelo $k-\omega$ SST
F	Função de combinação do modelo $k-\omega$ SST
F_{actker}	Parâmetro de ajuste do modelo de ignição
$\tilde{F}_{h,j}$	Fluxo de energia por difusão instantâneo, W/m^2
$F_{h,j}$	Fluxo de energia por difusão médio, W/m^2
g	Aceleração gravitacional, m/s^2
\tilde{h}	Entalpia estática instantânea, J
h	Entalpia estática média, J
h'	Flutuação da entalpia estática, J
\tilde{H}_m	Calor de formação instantâneo do constituinte m , J/kg
I	Intensidade turbulenta, m/s
I	Função do modelo de ignição
k	Energia cinética turbulenta, m^2/s^2
Ka	Número de Karlovitz $Ka = \frac{l_F^2}{\eta^2}$
k_B	Constante de Boltzmann
K_c	Representa a curvatura da chama
K_l	Coefficiente de estiramento laminar da chama
K_T	Taxa de deformação da chama
K_t	Coefficiente de estiramento turbulento da chama
$\tilde{K}_{T,m}$	Taxa de difusão térmica instantânea da espécie m
l	Escala de comprimento da turbulência, m
l_F	Espessura da chama, m

L	Curso do pistão, m
m	Coefficiente da função de Wiebe
M	Número de nós da malha
M	Massas moleculares, kg/kmol
N	Rotação do motor, rpm
n_I	Número de repetição de experimentos
\tilde{p}	Pressão instantânea, Pa
p	Pressão média, Pa
p'	Flutuação da pressão instantânea, Pa
\tilde{p}_s	Pressão estática instantânea, Pa
\tilde{p}_{st}	Pressão de estagnação instantânea, Pa
P	Pressão, Pa
Pe	Número de Peclet, $[\rho U \Delta x / \Gamma_\phi]$
Pr	Número de Prandtl
q_u	Fluxo de calor difusivo
q_w	Fator de extinção da chama
r_c	Razão de compressão
R	Constante universal dos gases, kJ/kmol·K
Re	Número de Reynolds, $[\rho U \Delta x / \mu]$
Re_t	Número de Reynolds turbulento, $[y \sqrt{k} / \nu]$
R_t	Taxa de reação líquida para produção de fuligem
R_k	Raio do <i>Kernel</i> , m
R_{klimit}	Parâmetro de ajuste do modelo de ignição
R_s	Razão de swirl
S_{conv}	Efeito da convecção na vela de ignição
S_l	Velocidade teórica da chama, m/s
S_{l0}	Velocidade laminar da chama adiabática, m/s
s_h	Fonte de energia, W/m ³
s_i	Fonte de quantidade de movimento, W/m ³
s_{ij}	Tensor taxa de deformação, 1/s
s_m	Fonte de massa, W/m ³
S_u	Velocidade laminar da chama, m/s

$S_{u\infty}$	Velocidade laminar da chama plana não estirada, m/s
S_{ij}	Tensor de deformação média
S_{ϕ}	Termo fonte por unidade de volume, W/m ³
S_{ω}	Constante do modelo $k-\omega$ SST
t	Tempo, s
t_1	Intervalo de tempo, s
t_2	Intervalo de tempo, s
t_F	Escala de tempo, s
t_{η}	Escala de tempo de Kolmogorov, s
t_{ij}	Tensor de tensão viscosa, Pa
\tilde{T}	Temperatura instantânea, K
T	Temperatura média, K
\tilde{T}_0	Temperatura instantânea de referência, K
T_0	Temperatura de referência média, K
T_{st}	Temperatura de estagnação, K
U	Magnitude da velocidade média local, m/s
U_l	Velocidade laminar da chama, m/s
U_{lam1}	Constante do modelo EFCM-3Z
U_{lam2}	Constante do modelo EFCM-3Z
U_{lam3}	Constante do modelo EFCM-3Z
\tilde{u}	Velocidade instantânea na direção x , m/s
u	Velocidade média na direção x , m/s
u'	Flutuação instantânea da velocidade na direção x , m/s
u^+	Velocidade adimensional
V	Volume, m ³
$\tilde{V}_{m,j}$	Componente j da velocidade de difusão, m/s
V_b	Volume dos gases queimados, m ³
V_c	Volume da câmara de combustão, m ³
\tilde{v}	Velocidade instantânea na direção y , m/s
v	Velocidade média na direção y , m/s
v'	Flutuação instantânea da velocidade na direção y , m/s

y_c	Distância normal a partir da parede, m
Y	Fração mássica
Y_{ft}	Fração mássica total de combustível
\tilde{Y}_m	Fração mássica instantânea da mistura m
Y_m	Fração mássica média da mistura m
Y_{Tf}	Fração mássica de combustível traçada
Y_{res}	Fração mássica de combustível residual no final do processo de combustão
y^+	Distância adimensional da parede
\tilde{w}	Velocidade instantânea na direção z , m/s
w	Velocidade média na direção z , m/s
w'	Flutuação instantânea da velocidade na direção z , m/s
w_f	Velocidade total da superfície da chama, m/s
X	Fração molar
X_{res}	Fração molar dos gases residuais
x_p	Função de Wiebe
Ze	Número de Zeldovich
Z_m	Fração média da mistura
Δx	Incremento espacial, m
Δt	Incremento temporal (passo de tempo), s

Letras Gregas

α	Constante do modelo de combustão
$\alpha_{\phi 1}$	Constante do modelo $k-\omega$ SST
$\alpha_{\phi 2}$	Constante do modelo $k-\omega$ SST
β	Constante dos modelos de combustão
β_1	Coefficiente constante da condição de contorno na parede
$\beta_{\phi 1}$	Constante do modelo $k-\omega$ SST
$\beta_{\phi 1}^*$	Constante do modelo $k-\omega$ SST
$\beta_{\phi 2}$	Constante do modelo $k-\omega$ SST
$\beta_{\phi 2}^*$	Constante do modelo $k-\omega$ SST

β_{min}	Coeficiente de ajuste do modelo ECFM-3Z
δ_{ij}	Delta de Kronecker
ε	Taxa de dissipação, m^2/s^3
ε_p	Taxa de dissipação na célula próxima da parede, m^2/s^3
ε_{LJ}	O potencial de Lennard-Jones
ϕ	Variável escalar dependente
ϕ	Razão de equivalência
γ	Fator de combinação do esquema numérico
γ	Relação de calor específico
κ	Constante de Von Kármán
λ	Condutividade térmica, $W/m \cdot K$
λ	Lambda
$\tilde{\mu}$	Viscosidade dinâmica molecular instantânea, $kg/m \cdot s$
μ	Viscosidade dinâmica molecular média, $kg/m \cdot s$
μ'	Flutuação da viscosidade dinâmica molecular, $kg/m \cdot s$
μ_t	Viscosidade turbulenta, $Pa \cdot s$
$\tilde{\nu}$	Viscosidade cinemática instantânea, m^2/s
ν	Viscosidade cinemática média, m^2/s
ν'	Flutuação instantânea da viscosidade cinemática, m^2/s
θ	Ângulo do eixo de manivelas, $^\circ$ (graus)
$\tilde{\rho}$	Densidade instantânea, kg/m^3
ρ	Densidade média, kg/m^3
ρ'	Flutuação instantânea da densidade, kg/m^3
ρ^{UM}	Densidade do gás na zona não misturada, kg/m^3
σ	Número de Prandtl turbulento
$\sigma_{k\phi 1}^\omega$	Constante do modelo $k-\omega$ SST
$\sigma_{k\phi 1}^\omega$	Constante do modelo $k-\omega$ SST
$\sigma_{k\phi 2}^\omega$	Constante do modelo $k-\omega$ SST
$\sigma_{k\phi 2}^\omega$	Constante do modelo $k-\omega$ SST
τ_{ij}	Tensor de tensão de Reynolds, Pa

τ	Escala de tempo
τ_w	Tensão cisalhante na parede, Pa
ω	Taxa de dissipação específica, m^2/s^3
ω_C	Taxa de dissipação específica na primeira célula, m^2/s^3
ω_s	Velocidade angular, rad/s
$\dot{\omega}_{Fu}$	Taxa da reação ou taxa de massa queimada
ζ	Fator de mistura
Γ_ε	Função do modelo ITNFS
Γ_k	Função de estiramento do modelo ITNFS
Γ_ϕ	Difusão da grandeza considerada, m^2/s
η	Espessura da chama de Kolmogorov, m
Σ	Densidade da superfície da chama
δ_l	Espessura térmica laminar, m
Ω_∞	Volume normalizado, m^3

Superíndices

n	Nível de tempo
m	Gases misturados

Subíndices

b	Denota o gás queimado
o	Coordenada de referência
C	Centróide da célula
c	Chama
E	Orientação da célula, leste
e	Face do volume, leste
f	Combustível
i	Direção i
i	Espécie i
j	Direção j

k	Direção w
m	Massa
N	Orientação da célula, norte
n	Faces do volume, norte
P	Ponto no centro da célula
S	Orientação da célula, sul
s	Face do volume, sul
u	Denota o gás não queimado
u_m	Região não misturada
W	Orientação da célula, oeste
w	Face do volume, oeste
∞	Denota a condição à frente
ϕ	Variável escalar dependente

1 INTRODUÇÃO

Os motores de combustão interna (ICE - *Internal Combustion Engine*) foram indispensáveis no crescimento industrial e, por esta razão, tornaram-se tão populares. O primeiro ICE operando no ciclo de quatro-tempos foi desenvolvido por Nicolaus August Otto em 1876 [Heywood, 1988]. Desde o seu surgimento, o ICE é a alternativa de fornecimento de potência mais utilizada no mundo em veículos de passeio, transporte de cargas e equipamentos: bombas, cortadores, motosserras, roçadeiras, geradores portáteis, entre outros. De fato, observa-se no dia a dia uma forte dependência da utilização de motores, motivo pelo qual a pesquisa nesta área tem uma história mais que centenária e, atualmente, os estudos visando o seu aumento de eficiência e diminuição de emissões de poluentes estão cada vez mais intensos. A justificativa que viabiliza o ICE como uma fonte de potência é a boa relação peso-potência, comparada com outros mecanismos. No entanto, estes motores possuem consideráveis índices de emissões de poluentes gerados pela liberação de gases na atmosfera [Reitz, 2013].

De acordo com as Nações Unidas no Brasil (ONUBR) a população mundial deve atingir 9,6 bilhões em 2050, quando atualmente é superior a 7 bilhões de pessoas. A representação deste crescimento é mostrada na Figura 1.1. Em resultado ao crescimento populacional e melhores padrões de vida da população há um aumento no consumo de combustível fósseis, e isso tende a crescer nos próximos anos [ONUBR, 2014].

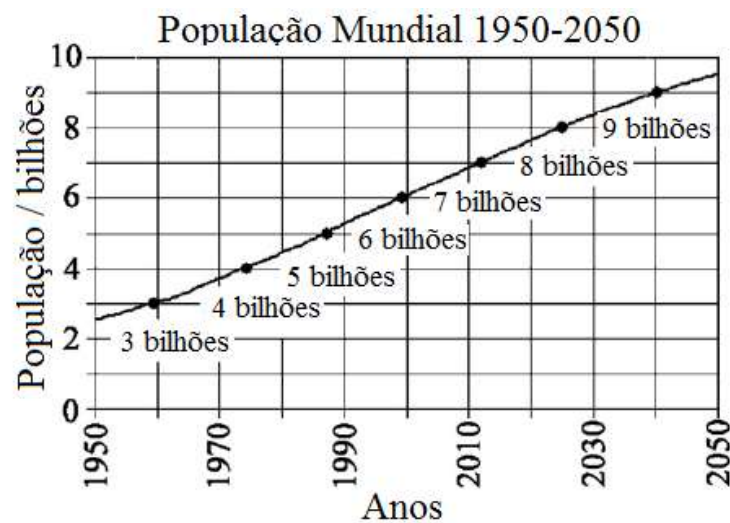


Figura 1.1 – Perspectiva de crescimento da população mundial [adaptado de *Population Division United States Census Bureau International Database*, 2014]

O setor de transporte é o principal responsável pelo aumento de consumo, onde a EIA (*Energy Information Administration*) projeta uma perspectiva do consumo de combustível líquido no setor de transporte para os próximos 20 anos, como mostrado na Figura 1.2 (a). O aumento da demanda de veículos reflete em maior consumo de combustível fóssil (líquidos e gás natural) gerando um aumento no índice de emissão de poluentes com a liberação de gases na atmosfera. A queima destes combustíveis tem significativa contribuição na quantidade de CO₂ (dióxido de carbono) liberada no meio ambiente. A Figura 1.2 (b) mostra a projeção mundial de emissão de CO₂. Diante deste crescimento, diversas políticas ambientais vêm sendo levadas a adotar parâmetros de controle de emissões, como exemplo a CONAMA (Conselho Nacional do Meio Ambiente) no Brasil. Valores de níveis máximos de emissões devem ser controlados e, para alcançar os mesmos, a utilização de injeção eletrônica e de conversores catalíticos no sistema de exaustão dos motores foram introduzidas. Entretanto, faz-se necessário desenvolver novas tecnologias, devido às restrições de emissões cada vez mais rígidas, que possibilitam melhores resultados na redução de consumo de combustível e níveis de emissões. Na área experimental, diversas pesquisas e avanços estão presentes, embora, os custos da realização do estudo na maioria das vezes são elevados [Reitz, 2013; Lakshminarayanan e Aghav, 2010; Lumley, 2008].

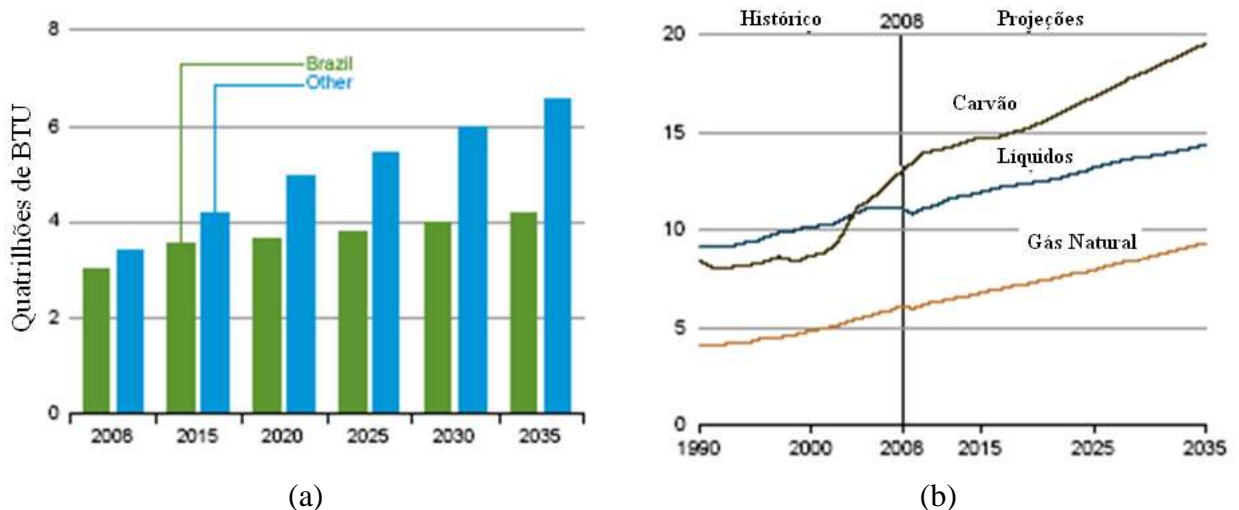


Figura 1.2 – Perspectiva de consumo de energia nos próximos anos [adaptado de EIA, 2012].

Alternativamente, com o desenvolvimento da computação e métodos numéricos, a simulação de processos termodinâmicos e termoquímicos tornou-se mais sofisticada e viável, permitindo modelar o processo de combustão juntamente com o escoamento turbulento. A aplicação da dinâmica dos fluidos computacional CFD (*Computational Fluid Dynamics*) vem

crescendo gradativamente nos últimos anos, sendo uma forma alternativa de estudo para o projeto de motores de combustão interna [Velghe *et al.*, 2011, Bohbot *et al.*, 2009]. Entretanto, as dificuldades concentram-se na representação da formação de espécies de gases, sendo que, atualmente, nota-se um desafio em relação aos modelos de combustão aplicados a motores, em função da grande quantidade de parâmetros (escoamento turbulento, crescimento do núcleo da chama, correlações empíricas, entre outros), associados a um domínio computacional móvel e geometricamente complexo. Diversos modelos de combustão denominados avançados estão surgindo e foram implementados em programas comerciais. Observa-se uma boa concordância na representação do escoamento e uma preocupação em relação ao processo reativo [Baritaud e Duclos, 1997 ; Colin e Benkenida, 2004 ; Korakianitis *et al.*, 2011 ; Reitz, 2013].

Visando a preocupação mundial no desenvolvimento de tecnologias que auxiliam no controle de emissões, cabe um estudo do fenômeno físico envolvido nos motores de combustão interna. Neste âmbito, o presente trabalho concentra-se na investigação numérica e experimental do processo de combustão para o motor monocilíndrico Honda GX35. O processo de combustão será introduzido na forma de combustão homogênea de metano, a uma rotação fixa (numérico) a fim de determinar os valores de vazão mássica de ar admitida e pressão interna no cilindro. A geometria é composta de um cilindro e duas válvulas. A solução numérica é obtida mediante a construção de uma malha tridimensional e a utilização de um código comercial em Volumes Finitos para resolvê-la. O estudo experimental foi realizado com características geométricas e operacionais semelhantes, a menos de algumas simplificações necessárias. Adicionalmente, o comportamento da formação de emissões fora discutido apresentando as dificuldades e o estado da arte deste tipo de modelagem.

1.1 Dados do Problema

Esta seção é dedicada a uma breve descrição das informações envolvidas no trabalho. Em particular, descrevem-se as características funcionais do motor estudado e as propriedades termofísicas do fluido de trabalho, extraídas do programa comercial Star-cd es-ice (*Expert System – Internal Combustion Engine*), utilizado na simulação.

1.1.1 Ciclo de Operação

O funcionamento de um motor de quatro tempos operando no ciclo Otto é mostrado na Figura 1.3. Os pontos que limitam o curso do pistão são conhecidos como ponto morto superior (PMS), onde o volume do cilindro é mínimo, e ponto morto inferior (PMI), quando o volume do cilindro é máximo. A sequência de eventos que produz um ciclo termodinâmico é dividido em quatro etapas: admissão, compressão, expansão e exaustão. Estas etapas são descritas da seguinte forma [Heywood, 1988; Ferrari, 2005]:

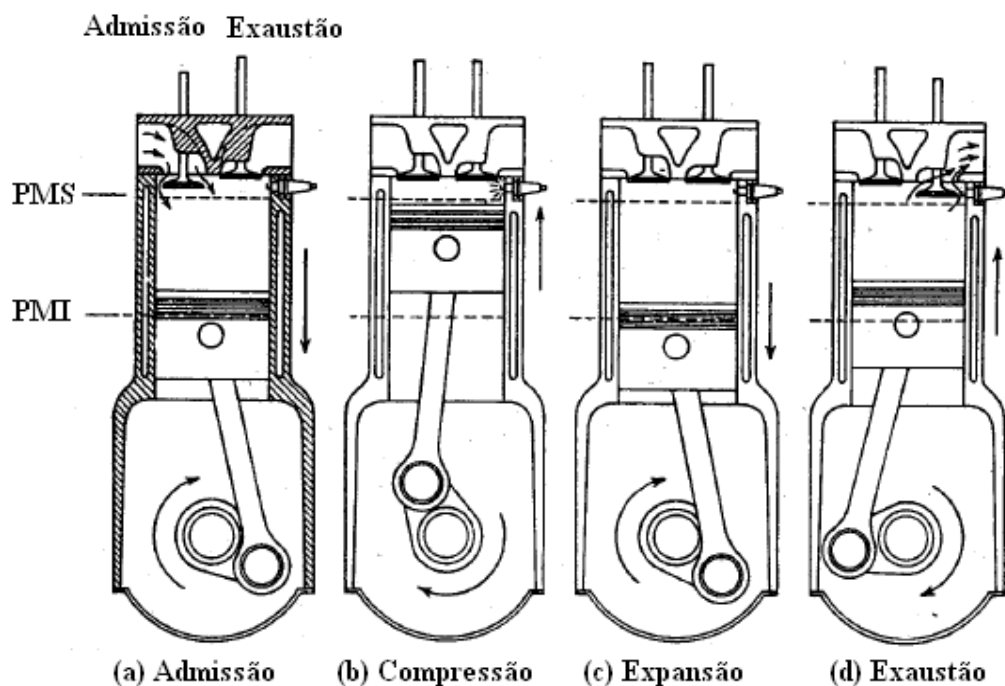


Figura 1.3 - Ciclo de operação Otto: (a) admissão; (b) compressão; (c) expansão; (d) exaustão [adaptado de Heywood, 1988].

- (a) Curso de admissão: o pistão realiza um movimento descendente ao longo do seu curso criando uma depressão dentro do cilindro, fazendo com que a carga fresca de ar e combustível seja admitida por meio da(s) válvula(s) de admissão. À medida que o pistão se aproxima do PMI, a depressão diminui, finalizando o processo de admissão. Esta etapa é fundamental na definição do campo de velocidades no interior do cilindro, a partir da geometria do motor.
- (b) Curso de compressão: à medida que o pistão sobe, o volume do cilindro diminui, aumentando a pressão e temperatura no seu interior. Ao se aproximar do PMS uma

centelha elétrica ocorre em um ponto dentro do cilindro iniciando o processo de combustão. Com a queima da carga, gera-se uma grande liberação de energia e um elevado aumento de pressão no cilindro.

- (c) Curso de expansão: o pistão realiza um movimento do PMS para o PMI, recebendo trabalho da expansão dos gases e gerando produtos da combustão.
- (d) Curso de exaustão: os gases gerados pela combustão são liberados através de um movimento ascendente do pistão juntamente com a abertura da válvula de exaustão.

1.1.2 Características do Motor

O motor considerado no presente trabalho é apresentado na Figura 1.4 e suas características são ilustradas na Tabela 1.1. O motor monocilíndrico contém duas válvulas (admissão e exaustão), com características geométricas diferentes e pistão com perfil superior plano. Opera no ciclo Otto e a mistura do ar-combustível é realizada por um carburador.



Figura 1.4 - Motor monocilíndrico Honda GX35 [Honda, 2012].

Trata-se de um motor monocilíndrico de baixo deslocamento, que possui aplicação comercialmente em roçadeiras, motocicletas de baixo custo e, atualmente, em veículos autônomos não tripulados (VANT).

Tabela 1.1 - Características do motor Honda GX35.

Descrição	Valor
Diâmetro do Cilindro (B)	39,00 mm
Curso do Pistão (L)	30,00 mm
Volume Deslocado	35,8 cm ³
Relação de Compressão (r_c)	8:1
Máxima abertura de válvula	2,82 mm
Potência Máxima @ 7000 RPM	1 kW
Torque Máximo @5500 RPM	1,6 N m

Honda, 2012.

1.1.3 Propriedades Termofísicas

O fluido de trabalho é a mistura de ar e o metano. Suas propriedades são resumidas na Tabela 1.2 e Tabela 1.3, respectivamente. A compressibilidade é considerada, e o fluido é tratado como gás perfeito.

Tabela 1.2 - Propriedades do ar.

Propriedade	Valor
Densidade	Ideal $f(T,p)$
Viscosidade	Sutherland $f(T)$
Condutividade	0,02637 W/m·K
Massa Molecular	28,96 kg/kmol

Star-cd, 2014a.

Tabela 1.3 - Propriedades do metano.

Propriedade	Valor
Densidade	0,65687 kg/m ³
Viscosidade	1,11906 x 10 ⁻⁵ kg/m·s
Calor Específico	2240,07 J/kg·K
Condutividade	0,0348195 W/m·K
Massa Molecular	16 kg/kmol

Star-cd, 2014a.

1.2 Motivação e Objetivos do Trabalho

Desde o seu surgimento, a combustão em motores é a área que vêm passando por diversos processos de desenvolvimento e, atualmente, os motores operando no ciclo Otto, juntamente com os de ciclo Diesel, possuem as tecnologias mais visadas, devido às aplicações na área de transporte, geração e indústria. Em função das rigorosas leis ambientais e da redução da disponibilidade de combustíveis fósseis, durante os próximos anos [EIA, 2012], surge o interesse em desenvolver a pesquisa e compreender o processo de combustão envolvido.

O objetivo deste trabalho é o desenvolvimento e a validação de metodologias numérica e experimental, para avaliar o comportamento dinâmico e reativo do escoamento em motores de combustão interna. Para isto, é realizada a análise numérica do processo de combustão de gás metano, reproduzindo a geometria tridimensional e o fenômeno físico real do motor para um modelo de combustão aplicado a motores. Atualmente, enfrenta-se dificuldades de conciliação destes aspectos, devido à complexidade e alto recurso computacional exigido, o que mostra ser ainda necessário o estudo dos fenômenos envolvidos no sistema motor-combustível, a fim de projetar e fabricar motores mais eficientes, que reduzam o consumo, preservando o meio ambiente e as reservas de combustíveis.

Os resultados numéricos são comparados com medições transientes adquiridas no motor Honda GX35, tais como a vazão do ar admitido e a pressão no interior do cilindro, em relação à posição do eixo de manivelas. Em relação aos modelos de combustão, os seus produtos são quantificados com o auxílio de um analisador de gases, visando apresentar as dificuldades enfrentadas nessa tarefa.

1.3 Organização do Trabalho

No presente capítulo é apresentada uma introdução sobre o tema. Em seguida informações geométricas e funcionais do motor em estudo são passadas, juntamente com as propriedades do fluido de trabalho em consideração.

No Capítulo 2 é apresentada uma revisão bibliográfica dos principais trabalhos numéricos e experimentais em motores. Apresentam-se alguns autores que têm publicado artigos relevantes ao assunto, bem como os objetivos e a motivação para a execução deste trabalho.

O Capítulo 3 refere-se à modelagem matemática pertinente ao escoamento turbulento e reativo estudado. A formulação matemática é descrita com base no equacionamento que o programa Star-cd/es-ice utiliza para resolver os casos em estudo.

O Capítulo 4 apresenta a modelagem numérica utilizada pelo mesmo programa para resolver as equações diferenciais. Faz-se menção apenas à formulação empregada.

O Capítulo 5 demonstra as metodologias utilizadas para gerar o domínio de cálculo e o experimento. Características sobre a criação do modelo numérico, condições iniciais e de contorno, equipamentos utilizados e condições de operação.

O Capítulo 6 é pertinente aos resultados obtidos pela simulação numérica e experimental, assim como a comparação entre eles. Os demais resultados são apresentados e discutidos para auxiliar no desenvolvimento de metodologias e conhecimento no tema.

O Capítulo 7 compreende as conclusões obtidas com o estudo, e trazem sugestões de continuidade do trabalho, com o objetivo de cooperar com o desenvolvimento do conhecimento na área.

Finalmente são apresentadas as referências bibliográficas, apêndices e anexos.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A turbulência (em razão da sua influência nas características da combustão) é um dos assuntos mais importante em ICE. Para obter boas condições no processo de combustão é essencial se ter um controle da turbulência durante o processo de admissão, sendo que o projeto de um motor requer um preciso detalhamento das grandezas e fenômenos envolvidos. O maior desafio nos últimos anos é simular o escoamento tridimensional, turbulento e transiente em modelos de turbulência e combustão, e que tenham bom compromisso com a física envolvida. Por outro lado, a experimentação, quando bem planejada e executada, conduz a bons resultados, mas apresenta ainda deficiências na questão de visualização e, em alguns casos, é proibitiva quando se deseja analisar um grande número de variantes no projeto [Lakshminarayanan e Aghav, 2010].

Um dos pioneiros na aplicação da técnica de CFD em motores a pistão, Gosman, 1985, apresentou uma avaliação do estado da arte da modelagem do escoamento multidimensional nestas máquinas. O autor observa significantes avanços na metodologia numérica, a ponto de ser possível o cálculo de escoamentos tridimensionais complexos presentes dentro da câmara de combustão de ICE, embora ainda exista um grande custo e esforço envolvido na criação da malha e solução dos sistemas de equações algébricas decorrentes. Um breve comentário sobre modelos de turbulência aplicados a motores é apresentado neste trabalho, onde são realçadas as deficiências do modelo $k-\varepsilon$, destacando que a abordagem LES (*Large Eddy Simulation*) poderia vir a tornar-se uma opção útil no futuro.

No âmbito do processo de combustão em ICE, Champion *et al.*, 1986, realizam um importante passo na modelagem da inicialização da chama laminar esférica pré-mistura de propano em função da energia de ativação (centelha elétrica). A modelagem numérica foi aproximada através de um modelo denominado termodifusivo, onde os efeitos convectivos foram negligenciados e a densidade e a pressão são consideradas constantes. Os resultados da modelagem são comparados com visualizações experimentais e apresentam boa concordância. Os autores ressaltam da importância da análise, a qual foi o primeiro passo dado para melhorar o conhecimento aplicado ao processo de combustão em motores. Subsequentemente, Champion, *et al.*, 1988, complementam o estudo adicionando os efeitos convectivos à evolução da chama laminar esférica para uma chama pré-misturada de propano. No mesmo contexto, Pope, 1988, e 1990, apresentam a formulação para evolução da chama laminar esférica em escoamentos turbulentos e para o método PDF (*Probability Density Function*),

onde é realizado um balanço para a densidade da área da superfície da chama a partir de uma equação de transporte. Candel e Poinso, 1990, complementam a equação de balanço considerando os efeitos de enrugamento da chama devido ao escoamento turbulento, tanto quanto a variação da área da chama ao longo do tempo. Estes estudos foram fundamentais para o avanço da metodologia numérica em motores de combustão interna.

Pope, 1990a, apresenta os progressos e desafios da modelagem da combustão turbulenta aplicados a dispositivos que utilizam o processo de combustão, incluindo motores. Neste trabalho, evidencia-se o desenvolvimento de metodologias envolvendo cinética química e afirma-se que o método PDF aparece como sendo a principal aproximação disponível e aplicável a reações não lineares em geometrias não cartesianas. Destaca-se ainda o potencial da aplicação de DNS (*Direct Numerical Simulation*) para determinar as características do escoamento e auxiliar na caracterização dos problemas que envolvam combustão, possibilitando a modelagem do escoamento inerte sobre o escoamento reativo.

O escoamento em motores é altamente turbulento. Desta forma, ao adicionar o processo de combustão, os efeitos da turbulência na modelagem da combustão devem ser considerados. Algumas metodologias para determinar o processo de combustão estão presentes na literatura, seja por métodos assintóticos, por métodos numéricos e/ou experimentais. Embora muitos conhecimentos destes processos sejam apresentados para escoamento laminares, na aplicação de ICE ficam limitados, devido à complexidade das geometrias, aos efeitos da turbulência serem altamente dominantes e ao processo de ignição não acontecer à pressão constante. Em função destas limitações, Boudier, *et al.*, 1992, propõem o acoplamento entre o escoamento turbulento pré-misturado e o modelo de ignição (proposto por Pischinger e Heywood, 1990, Ko *et al.*, 1991) para a combustão turbulenta em ICE. O modelo é ajustado para aplicação em motores e é denominado como LI-CFM (*Laminar Ignition - Coherent Flame Model*), sendo uma evolução do modelo CFM (*Coherent Flame Model*) original, onde utiliza-se o conceito de *flamelet*, isto é, considera a chama como um elemento que se estabelece em escalas nas quais o escoamento possa ser considerado como laminar (Poinso *et al.*, 1991, Baritaud e Green, 1986). A implementação foi realizada no programa Kiva para o motor GSM-IFP, numa malha computacional tridimensional axissimétrica e rotação de 1200 rpm. Os resultados para a fração mássica queimada e distribuição da densidade da área da chama foram comparados entre os estudos numéricos e experimentais, apresentando boa concordância.

Weller *et al.*, 1994, propõem um modelo de combustão pré-misturado para motores com ignição por centelha, baseado na evolução das formulações apresentadas por Pope, 1988,

e Candel e Poinso, 1990. O modelo de combustão foi implementado no código comercial Star-cd para um domínio computacional de 40.000 volumes, sendo os resultados comparados com dados experimentais obtidos por medidas de LDA (*Laser Doppler Anemometry*). Os resultados para a estrutura da chama apresentaram progressos em relação às antigas formulações. No entanto, os autores ressaltam que é necessário estender a aplicação para uma maior faixa de condições operacionais.

Torres e Henriot, 1994, analisam a fase de combustão pobre de propano para um motor multiválvulas empregando o programa Kiva-II e o modelo LI-CFM. Duas configurações diferentes de coletor-válvula foram analisadas. Na primeira situação, foi considerado o motor com apenas uma válvula e um coletor de admissão. No segundo caso consideraram duas válvulas e dois coletores. Na comparação foram encontradas diferenças entre as estruturas do escoamento, principalmente no nível de turbulência e propagação da chama. A primeira configuração apresentou-se mais favorável à operação de misturas pobres, atribuída ao alto nível de turbulência e maior estabilidade no movimento do fluido. Os resultados numéricos da pressão no cilindro foram comparados com medições experimentais, apresentando o mesmo nível e localização do pico de pressão.

Zhao *et al.*, 1994, utilizando o código Kiva-II simularam o processo de combustão em dois motores de bancada desenvolvida para pesquisa. Os modelos de combustão CFM e FFM (*Fractal Flame Model*), que utilizam como equação de transporte a área da superfície da chama, foram empregados para determinar a fração de massa queimada para o gás propano. Os resultados numéricos foram confrontados com dados experimentais, onde o modelo FFM apresentou melhores resultados para ambos os motores.

Considerando o modelo de combustão CFM e estendendo sua aplicação para mistura rica de propano, Baritaud e Duclos, 1997, realizam o estudo da emissão de poluentes para um motor de ignição por centelha com carga estratificada. Utilizaram o código Kiva-II para uma simples geometria de motor bidimensional, rotação de 1200 rpm e temperatura da parede da câmara de combustão de 400 K. A admissão de ar é prescrita através de uma eficiência volumétrica de 0,5 e uma intensidade de escoamento (*swirl*) de 3,8. A formação de emissões de NO (óxido de nitrogênio) e CO (monóxido de carbono) foi modelada através da temperatura dos gases queimados. Os resultados experimentais divergiram em mais de 20 % e os autores atribuem esse desvio ao modelo de cinética não representar corretamente os níveis de formação de gases de combustão em situações com altas rotações (curto tempo para a formação destes gases). No entanto, concluem que os resultados permitem uma boa estimativa para o projeto de motores em relação à formação do campo de emissões.

Duclos e Zolver, 1998, ressaltam a importância da injeção direta de combustível no cilindro em motores de ignição por centelha. A partir deste tema, propõem simular o comportamento da combustão para um motor com injeção direta de gasolina (GDI – *Gasoline Direct Injection*), com auxílio do código Kiva-II. Nas simulações, são consideradas tanto cargas homogêneas quanto estratificadas, com misturas pobres e estequiométricas. O modelo de combustão empregado é o SKI-CFM, sendo uma evolução do modelo CFM, onde as equações traçadas (*tracer*) são acopladas ao um modelo de spray. Os resultados da simulação são comparados com dados experimentais do campo de pressão média no cilindro, e a formação de NO e de CO. Os resultados numéricos para a pressão no cilindro apresentaram boa concordância, no entanto, para a formações de NO e CO, ocorreram discrepâncias que os autores associam a altas temperaturas locais em certos pontos no interior do cilindro.

Com o propósito de minimizar as dificuldades envolvidas na modelagem da combustão de motores GDI, Duclos *et al.*, 1999, realizaram melhorias no modelo CFM com a adição de funções que descrevem a injeção de combustível, a evaporação e a combustão. Este modelo foi denominado de ECFM (*Extended Coherent Flame Model*). Comparações entre dados numéricos e experimentais apresentaram uma evolução. Mais tarde, Colin *et al.*, 2003, adaptaram o modelo CFM para simular o processo de combustão pré-misturada heterogênea, ou seja, o modelo permite descrever localmente a razão combustível-ar através de uma razão de equivalência dos gases frescos. Este modelo também é denominado de ECFM. Os dados numéricos foram confrontados com medições experimentais feitas através de LIF (*Laser Induced Fluorescence*) e pressão média no cilindro. Os resultados demonstram que o modelo ECFM reproduz com exatidão a evolução da pressão do cilindro, quando comparada com a experimentação. Em relação à combustão, o modelo reproduz corretamente a evolução experimental da razão de equivalência no local de ignição, bem como os aspectos qualitativos e quantitativos da distribuição espacial de combustível na câmara de combustão. Henriout *et al.*, 2003, e Kleement *et al.*, 2003, também apresentam a validação do modelo ECFM para a combustão pré-misturada.

Colin e Benkenida, 2004, adicionaram ao modelo ECFM a opção de combustão difusiva com o intuito de empregar esse modelo em motores Diesel, e chamam o modelo de ECFM-3Z (*Extended Coherent Flame Model – 3 Zones*). O modelo ECFM-3Z considera a mistura a ser queimada representada por três zonas, isto é, a zona com apenas combustível não misturado, a zona com ar não misturado mais a possibilidade de EGR (*Exhaust Gas Recirculation*), e a zona de mistura, onde nesta última o modelo ECFM é aplicado. O modelo foi validado através da comparação dos resultados numéricos da pressão e a fração de massa

total queimada com os resultados medidos experimentalmente, apresentando boa concordância.

Zellat *et al.*, 2005, utilizaram o modelo de combustão ECFM-3Z empregando o código Star-cd/es-ice para descrever o comportamento do modelo em relação a altos níveis de EGR, maiores do que 30 %. O modelamento tridimensional foi empregado com simplificações nos coletores para a aplicação em um motor GDI e outro Diesel. Os resultados numéricos demonstraram boa concordância com os dados experimentais de pressão no interior do cilindro. O mesmo ocorre para a formação de CO, NO e fuligem.

Knop *et al.*, 2008, realizaram a modelagem tridimensional considerando apenas o cilindro, totalizando 500.000 células. O código IFP foi utilizado para acoplar o modelo de combustão ECFM e o modelo de Zeldovitch modificado para formação de NO. Hidrogênio é utilizado como combustível e é injetado diretamente no cilindro. Comparações entre os resultados numéricos e experimentais foram feitas, mostrando uma concordância na evolução da pressão interna no cilindro. No entanto, para emissão de NO há uma grande dispersão no valor global, superior a 100 % para o modelo padrão de Zeldovich, e próximo de 50 % para o modelo modificado. Os autores atribuem esta discrepância ao modelo de formação de NO não representar corretamente a formação de emissão.

Bougrine *et al.*, 2011, propuseram utilizar um modelo computacional de 0-dimensão para analisar o processo de combustão de metano no cilindro, comparando duas abordagens diferentes: uma a partir de dados tabulados (denominada t.c.); e outra a partir de uma reação química de um passo (denominada s.s.c). Foram realizadas 59 medições, onde a pressão interna do cilindro apresentou bons resultados, com erros na faixa de 1 %. Os resultados em relação ao processo de combustão mostraram consideráveis discordâncias, chegando a erros na ordem 90 %. A Figura 2.1 apresenta os erros relativos para CO e NO. Observa-se que a abordagem s.s.c apresenta os maiores erros.

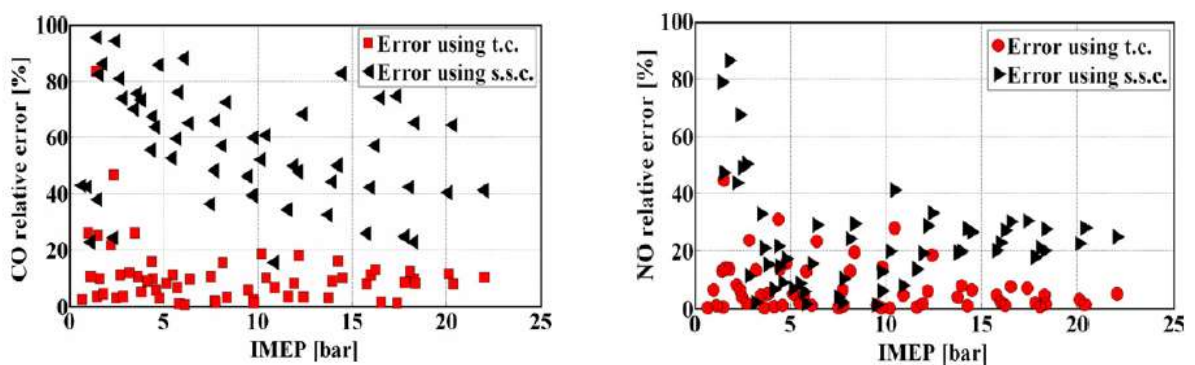


Figura 2.1 – Resultados dos erros para CO e NO [Bougrine *et al.*, 2011].

Velghe *et al.*, 2011, realizaram o estudo do tempo computacional utilizando processamento paralelizado em aplicações a motores de combustão interna. O código computacional IFP-C3D e o modelo ECFM foram empregados para análise do escoamento transiente e reativo, respectivamente. O domínio computacional variou de 1.000.000 de células, no PMI, a 110.000 células no PMS, considerando a remoção dos coletores durante o processo de combustão. A Figura 2.2 demonstra os resultados do aumento de velocidade de processamento em relação a dados teóricos, para cada curso do motor. Observa-se uma elevada redução da velocidade ao comparar os cursos de admissão e combustão, mesmo no caso do processo de combustão ser realizado sem a presença das células dos coletores, fato atribuído ao emprego do modelo de combustão nesta etapa.

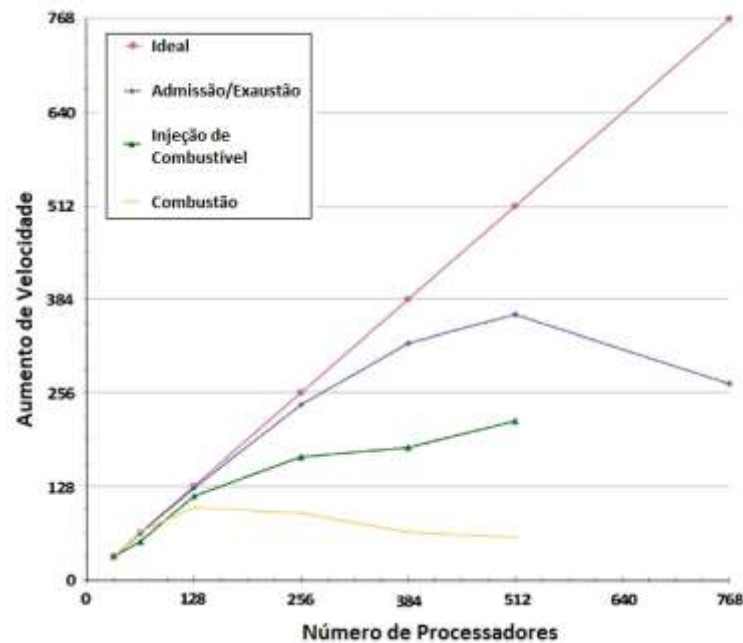


Figura 2.2 – Tempo de processamento [adaptado de Velghe *et al.*, 2011].

Mariani *et al.*, 2012, focam seus estudos na determinação da emissão de NO utilizando um código de zero dimensões para uma razão de equivalência estequiométrica. O combustível é mesclado entre hidrogênio e gás natural, em diferentes proporções, com o objetivo de melhorar a eficiência volumétrica e reduzir a emissão de NO. Concluem que a adição de hidrogênio na mistura aumenta a taxa de combustível queimado. Em relação às emissões, quanto maior a parcela de hidrogênio maior a formação de NO, devido ao aumento de temperatura no cilindro.

Concluindo, pode-se declarar que os principais trabalhos que auxiliaram no desenvolvimento dos modelos de combustão aplicados a motores de combustão interna foram aqui apresentados. Observa-se um grande esforço no desenvolvimento destes modelos, devido à sua importância e necessidade, mas ainda existe uma grande dificuldade na aplicação destes modelos às geometrias tridimensionais. O principal motivo são as ainda necessárias simplificações, tais como: simulação apenas da geometria do cilindro, ou em apenas $\frac{1}{4}$ da geometria. Utilizam-se, nestes casos, dados experimentais como condição de contorno, simplificações nos coletores e partes internas que formam a geometria da câmara de combustão. Tais simplificações causam alterações no escoamento e, conseqüentemente, podem levar a resultados errôneos ao considerar o processo de combustão.

3 MODELAGEM DO ESCOAMENTO TURBULENTO E REATIVO

A turbulência é um fenômeno inerentemente tridimensional, rotacional e dependente do tempo. Assim, uma enorme quantidade de informações é requerida para completamente descrever o escoamento turbulento. Certamente, deve-se esperar a complexidade da matemática envolvida sendo que esta aumenta na medida em que se deseja um detalhamento do estudo. Por outro lado, quando se almeja uma simples informação global sobre o escoamento, um modelo de *comprimento de mistura* basta. Porém, ao requerer um completo histórico de cada aspecto do escoamento turbulento, a solução das equações de Navier-Stokes se faz necessária. Tais equações necessitam de um tratamento numérico para serem resolvidas, sem mencionar o recurso computacional necessário.

A turbulência é caracterizada por flutuações das propriedades do fluido num escoamento, não havendo assim uma abordagem determinística do problema, quando se deve utilizar métodos estatísticos para a sua solução. Por mais que se tenha um completo histórico do escoamento turbulento, deve-se geralmente integrar as propriedades do escoamento de interesse ao longo do tempo para obter uma média temporal. De outra forma, a operação de média conduz a utilizar correlações estatísticas nas equações de movimento. Este é o clássico problema de fechamento, onde as equações de transporte turbulento passaram a ter variáveis desconhecidas (tensor de Reynolds) e elas devem ser relacionadas com o escoamento em forma acoplada à própria solução. Por isso, é necessário adicionar relações diferenciais ou algébricas.

Na mecânica dos fluidos computacional, há basicamente duas maneiras de se resolver o problema de fechamento [Wilcox, 2000]:

- Os que utilizam as equações RANS (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) e consideram a hipótese de fechamento para o tensor Reynolds. Esta família de modelos pode ser subdividida em:
 - (a) Modelos que utilizam a consideração da hipótese de Boussinesq (EVM);
 - (b) Modelos que introduzem a equação de transporte para cada um dos seis termos do tensor de Reynolds (RSM - *Reynolds Stress Models*).
- O que utiliza o procedimento LES: simula os vórtices maiores e modela os vórtices menores.

Uma alternativa, ainda que computacionalmente inviável para a maioria dos problemas de interesse em engenharia, é resolver diretamente as equações que descrevem o escoamento, com a necessária discretização espacial e temporal. Este procedimento é conhecido como DNS [Wilcox, 2000].

A qualidade de uma simulação numérica de um escoamento com reações químicas depende dos modelos de turbulência e combustão adotados, bem como do método numérico utilizado para resolver as equações de transporte. Com o desenvolvimento da computação, a simulação encontra-se em um estágio onde os erros numéricos são mantidos sob controle, enquanto que os modelos introduzem um grau de incerteza.

Apesar de três décadas de desenvolvimento, existem alguns efeitos físicos para os quais os modelos de turbulência não têm obtido resultados satisfatórios. São eles: escoamentos com curvaturas bruscas; pontos de separação; tridimensionalidade; *swirl*; modelagem próximo à parede; rotação e empuxo. Estes são, exemplos mais expressivos. Tais efeitos estão presentes em muitos escoamentos turbulentos. No entanto, sua modelagem ainda apresenta dificuldades, não devido à insuficiente compreensão da física, mas por causa de uma aparente necessidade de empregar formulações matemáticas e esquemas numéricos de maior complexidade do que até então foi usado para modelos mais simples.

Um dos modelos adequados para capturar os efeitos citados foi proposto por Menter, 1993, onde inovou com sua proposta de um modelo híbrido, que utiliza o modelo $k-\varepsilon$ padrão [Launder e Spalding, 1974] nas regiões afastadas da parede e o modelo $k-\omega$ original [Wilcox, 1988] nas regiões próximas à parede. A transição entre os modelos é realizada com o auxílio de uma função que varia entre 1, nas proximidades da parede, e 0 nas regiões livres de cisalhamento. O modelo é conhecido com $k-\omega$ SST (*Shear Stress Transport*), e traz boa aproximação para situações onde há descolamento da camada limite e alguns casos da camada cisalhante livre.

O presente capítulo apresenta em detalhes as equações governantes, do modelo de turbulência e de combustão, aplicadas a motores de combustão interna, utilizados para a simulação de escoamento de interesse. Por fim, o equacionamento é apresentado sob notação cartesiana indicial.

3.1 Equações Médias de Reynolds

A solução analítica da equação de Navier-Stokes só é possível para situações particulares, não sendo, portanto, um método viável para maioria dos escoamentos.

Entretanto, a resolução da equação por um método numérico é a forma usualmente adotada para o cálculo na maioria dos problemas de engenharia que envolva escoamento. Porém, para escoamentos turbulentos, a resolução numérica direta destas equações exige um esforço computacional muito grande.

Em Chen e Jaw, 1998, encontra-se uma estimativa para simulação numérica direta da turbulência, onde a ordem de grandeza das malhas de cálculo é obtida por análise dimensional, dado pela seguinte relação:

$$M \approx \text{Re}^{9/4} \quad (3.1)$$

onde M representa o número de nós da malha de cálculo e Re é o número de Reynolds. Portanto, para um número de Reynolds de 10^5 , será necessária uma malha de cálculo com cerca de 10^{11} nós. Assim, a resolução numérica direta de escoamentos turbulentos provocará um elevado custo computacional decorrente do tamanho da malha de cálculo.

Outra maneira de abordagem é a substituição das variáveis instantâneas da equação de Navier-Stokes, por variáveis médias do escoamento turbulento. Esta alternativa reduz enormemente o custo computacional pelo fato de que as equações médias admitem o uso de malhas com menor número de nós, resultando em soluções médias. Porém, esta abordagem causa perda de informações, inerentes ao processo de transformação das equações instantâneas.

A obtenção das equações de Navier-Stokes pelo processo de média é realizada pela introdução da decomposição de Reynolds e suas equações são apresentadas a seguir.

3.1.1 Decomposição de Reynolds

Essa abordagem, proposta por Osborne Reynolds, reescreve as equações do movimento turbulento em termos de médias temporais, denominadas médias *ensembles*. O valor instantâneo da velocidade, \tilde{u} , é definido por [Tennekes e Lumley, 1972, Hinze, 1975]

$$\tilde{u} = u + u' \quad (3.2)$$

onde u é a velocidade média e u' a flutuação instantânea da velocidade, de modo que $\overline{u'} = 0$. Este procedimento também é conhecido como decomposição de Reynolds.

Ao utilizar o valor médio, a informação sobre as flutuações é perdida, como mostra a Figura 3.1. Seu valor médio u é definido a partir da média *ensemble*, de acordo com as Equações (3.3) e (3.4), respectivamente [Tennekes e Lumley, 1972 ; Hinze, 1975]

$$u = \lim_{t_1 \rightarrow \infty} \frac{1}{t_1} \int_t^{t+t_1} \tilde{u}(t) dt \quad (3.3)$$

$$u = \lim_{n_1 \rightarrow \infty} \frac{1}{n_1} \sum_{n=1}^{n_1} \tilde{u}(t) \quad (3.4)$$

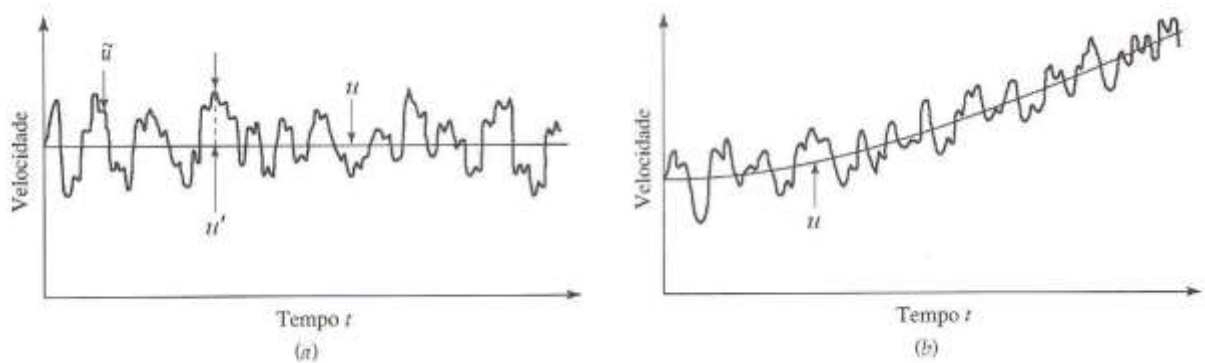


Figura 3.1 - Componentes das velocidades instantânea, média temporal e flutuação:

(a) escoamentos em que u não depende do tempo; (b) situação onde u depende do tempo

[adaptado de Bird *et al.*, 2004].

sendo t_1 o intervalo de tempo suficientemente longo para fornecer uma função média suave, n_1 o número de repetição de experimentos e t o tempo.

Portanto, a ideia de Reynolds foi decompor cada propriedade em uma média mais uma variável flutuante

$$\begin{aligned} \tilde{u} &= u + u' & \tilde{v} &= v + v' & \tilde{w} &= w + w' & \tilde{p} &= p + p' & \tilde{\rho} &= \rho + \rho' \\ & & \tilde{\nu} &= \nu + \nu' & \tilde{\mu} &= \mu + \mu' & & & & \end{aligned} \quad (3.5)$$

onde u, v, w são as velocidades nas direções x, y e z , respectivamente. Já, p é a pressão, ρ é a densidade, ν é a viscosidade cinemática e μ é a viscosidade molecular.

3.1.2 Conservação de Massa

A equação da conservação de massa, também conhecida como equação da continuidade, pode ser obtida analisando a taxa mássica do escoamento que entra e sai de um determinado volume de controle infinitesimal. Em notações cartesianas indiciais tem-se [Warsi, 1981]

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{\rho} \tilde{u}_j) = s_m \quad (3.6)$$

onde \tilde{u}_j representa o componente da velocidade instantânea na direção j e s_m é a fonte de massa. Considerando um volume de controle infinitesimal, o acréscimo e decréscimo temporal da massa específica são controlados pelo transporte convectivo de massa sobre as fronteiras deste volume de controle.

A equação da continuidade para escoamento compressível ($\tilde{\rho} \neq \text{constante}$) em termos da formulação da média *ensemble* resulta na seguinte relação

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = s_m \quad (3.7)$$

3.1.3 Transporte da Quantidade de Movimento

As equações de movimento são derivadas da Segunda Lei de Newton, a qual estabelece que o produto da massa pela aceleração é igual a soma das forças externas atuando sobre um corpo [Schlichting, 1979]. Assim, no movimento do fluido é necessário considerar duas classes de forças: forças que agem sobre a massa do corpo (forças de campo) e forças que atuam na fronteira (pressão e atrito).

A forma não conservativa do termo convectivo é inconveniente para resolução numérica da equação. As soluções obtidas a partir de formas conservativas são sempre significativamente menos sensíveis a erros numéricos. Em notação indicial, a equação do transporte da quantidade de movimento, $\tilde{\rho} \tilde{u}_i$, para um escoamento compressível pode ser escrita como [Warsi, 1981]

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j - t_{ij}) = -\frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} \delta_{ij} + s_i \quad (3.8)$$

onde δ_{ij} representa o delta de Kronecker ($\delta_{ij} = 1$ para $i = j$ e $\delta_{ij} = 0$ para $i \neq j$), s_i é a componente do termo fonte de quantidade de movimento, o qual representa a soma das forças de corpo e externas quando presentes. Todavia, o Star-cd acomoda qualquer forma especificada pelo usuário para o termo fonte. A pressão, \tilde{p} , que aparece na Equação (3.8) refere-se à pressão piezométrica, onde é definida da seguinte forma

$$\tilde{p} = \tilde{p}_s - \tilde{\rho}_0 g x_0 \quad (3.9)$$

sendo que, \tilde{p}_s é a pressão estática, $\tilde{\rho}_0$ a densidade de referência, g é a aceleração gravitacional e x_0 é a coordenada relativa a posição em que a densidade de referência é definida. Por fim, t_{ij} é o tensor de tensão viscosa. Para este último, assumindo a *hipótese de Stokes*, que reduz o número de propriedades que caracterizam o campo de tensões em um escoamento compressível e, assim, o tensor é definido por [Schlichting, 1979]

$$t_{ij} = 2\tilde{\mu} s_{ij} - \frac{2}{3}\tilde{\mu} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (3.10)$$

onde s_{ij} é o tensor de taxa de deformação, definido por

$$s_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.11)$$

A equação média da quantidade de movimento é obtida ao aplicar o conceito de média *ensemble* ao termo de velocidade na equação do movimento, como mostrado na Equação (3.12). Outras quantidades turbulentas, tais como pressão e densidade, também são representadas pela média *ensemble*, resultando em

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j - \tau_{ij}) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + s_i \quad (3.12)$$

A equação acima é usualmente denominada como URANS (*Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes*). Ao comparar a Equação (3.8) com (3.12), observa-se o surgimento de um novo termo, τ_{ij} , que resulta da aplicação da média e representa o valor médio da taxa de transferência de quantidade de movimento devida às flutuações turbulentas. Este tensor é conhecido com tensor das tensões de Reynolds e, em muitas vezes, aparece da seguinte forma

$$\tau_{ij} = t_{ij} - \overline{\rho u'_i u'_j} \quad (3.13)$$

O tensor de Reynolds $\overline{\rho u'_i u'_j}$, por ser simétrico, possui seis componentes independentes. Sendo assim, as equações representativas do escoamento turbulento são compostas por dez variáveis: seis correspondentes ao tensor de Reynolds, três definidas pelas componentes médias de velocidade e mais a componente de pressão. Portanto, o sistema de equações médias de Reynolds é composto por dez incógnitas e quatro equações. Para resolver este problema de fechamento, é necessário que as variáveis que compõem o tensor de Reynolds sejam modeladas. A modelagem pode ser de natureza constitutiva, apoiada em dados experimental, ou de natureza evolutiva, resultantes de procedimentos analíticos aplicados às equações da continuidade e quantidade de movimento.

3.1.4 Conservação de Energia

A formulação matemática da equação da energia pode ser obtida de muitas formas. A maneira apresentada aqui é em função da entalpia estática para mistura de fluido, como proposto por Jones, 1980

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{\rho} \tilde{h} \tilde{u}_j + \tilde{F}_{h,j}) = \frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} + \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_j} + t_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + s_h \quad (3.14)$$

onde s_h é termo fonte ou sorvedouro de energia devido às reações químicas, exotérmicas ou endotérmicas, respectivamente. Outras formas de energia, por exemplo reação nuclear, podem ser inseridas no termo fonte. A entalpia estática \tilde{h} é definida pela soma das componentes térmica e química por

$$\tilde{h} = \bar{c}_p \tilde{T} - c_p^0 \tilde{T}_0 + \sum \tilde{Y}_m \tilde{H}_m \quad (3.15)$$

sendo \bar{c}_p o calor específico médio a pressão constante na temperatura \tilde{T} , c_p^0 o calor específico de referência na temperatura \tilde{T}_0 , \tilde{Y}_m a fração de massa da mistura m e \tilde{H}_m é o calor de formação do constituinte m . Para a relação do fluxo de energia por difusão, $\tilde{F}_{h,j}$, assume-se que os fluxos difusivos moleculares de calor e massa satisfazem as leis de Fourier e Fick, respectivamente, logo

$$\tilde{F}_{h,j} = -\lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \sum_m \tilde{h}_m \rho \tilde{Y}_m \tilde{V}_{m,j} \quad (3.16)$$

onde λ é a condutividade térmica, \tilde{T} a temperatura instantânea, $\tilde{V}_{m,j}$ é a componente j da velocidade de difusão V_m do constituinte m . A velocidade de difusão pode ser expressa como

$$\tilde{V}_m = -\frac{1}{\tilde{X}_m} \tilde{D}_m \nabla \tilde{X}_m - \frac{\tilde{D}_m^T}{\tilde{\rho} \tilde{Y}_m} \nabla \ln \tilde{T} = -\frac{\tilde{D}_m}{\tilde{X}_m} (\nabla \tilde{X}_m + \tilde{K}_{T,m} \nabla \ln \tilde{T}) \quad (3.17)$$

sendo \tilde{X}_m a fração molar da espécie m , \tilde{D}_m a difusividade molecular da espécie m , \tilde{D}_m^T o coeficiente de difusão térmica da espécie m e $\tilde{K}_{T,m}$ a taxa de difusão térmica da espécie m definido como

$$\tilde{K}_{T,m} = -\frac{\tilde{X}_m}{\tilde{\rho} \tilde{Y}_m} \cdot \frac{D_m^T}{D_m} \quad (3.18)$$

Nas situações de escoamento turbulento, o Star-cd, 2014a, assume que a difusão térmica não é considerada importante, exceto para espécies de gases leves como He , H_2 e H atômico [Warnatz, 1982 ; Star-cd, 2014a]. Portanto, a taxa de difusão térmica dos gases leves para qualquer par de gases é calculado como [Hirschfelder *et al.*, 1954 ; Warnatz, 1982],

$$\tilde{K}_{T,12} = f \frac{15(2A^*+5)(6C^*-5)}{2A^*(16 \cdot A^* - 12B^* + 55)} \frac{M_1 - M_2}{M_1 + M_2} X_1 X_2 \quad (3.19)$$

e

$$A^* = \frac{\Omega^{(2,2)*}}{\Omega^{(1,1)*}} \quad ; \quad B^* = \frac{5\Omega^{(1,2)*} - 4\Omega^{(1,3)*}}{\Omega^{(1,1)*}} \quad ; \quad C^* = \frac{\Omega^{(1,2)*}}{\Omega^{(1,1)*}} \quad (3.20)$$

onde M_1 e M_2 são os pesos moleculares das espécies 1 e 2, respectivamente, Ω^* representa as integrais de colisão de forma reduzida, determinadas pelas seguintes expressões

$$\begin{aligned} \Omega^{(1,2)*} &= a_{12}(T^*)^{-b_{12}} + c_{12} \exp(-d_{12}T^*) + e_{12} \exp(-f_{12}T^*) + g_{12} \exp(-h_{12}T^*) \\ \Omega^{(1,3)*} &= a_{13}(T^*)^{-b_{13}} + c_{13} \exp(-d_{13}T^*) + e_{13} \exp(-f_{13}T^*) \end{aligned} \quad (3.21)$$

e

$$\begin{aligned} a_{12} &= 1,00220 \quad ; \quad b_{12} = 0,15530 \quad ; \quad c_{12} = 0,16105 \quad ; \quad d_{12} = 0,72751 \\ e_{12} &= 0,86125 \quad ; \quad f_{12} = 2,06848 \quad ; \quad g_{12} = 1,95162 \quad ; \quad h_{12} = 4,84492 \\ a_{13} &= 0,96573 \quad ; \quad b_{13} = 0,15611 \quad ; \quad c_{13} = 0,44067 \quad ; \quad d_{13} = 1,52420 \\ e_{13} &= 2,38981 \quad ; \quad f_{13} = 5,08063 \end{aligned} \quad (3.22)$$

considerando que X_1 e X_2 são as frações molares das espécies 1 e 2, respectivamente, e T^* é a temperatura reduzida definida como

$$T^* = \frac{k_B \tilde{T}}{\varepsilon_{LJ}} \quad (3.23)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann e ε_{LJ} representa o potencial de Lennard-Jones. A Equação (3.23) é aplicada para $0,3 \leq T^* \leq 100$ com um desvio médio de 0,064 %, conforme descrito em Neufeld *et al.*, 1972, onde demais informações estão disponíveis.

O fator f da Equação (3.19) é introduzido com o objetivo de calcular a taxa de difusão térmica de um par de gases diferentes. Sem a presença do fator, a expressão é apenas aplicada

a um par de gases pesados [Hirschfelder *et al.*, 1954]. O Star-cd, 2014a, utiliza os seguintes valores para o fator f

$$\begin{aligned} f &= 0,5 \quad \text{se } X_1 \leq 0,5 \\ f &= 0,9 \quad \text{se } X_1 > 0,5 \end{aligned} \quad (3.24)$$

Em uma mistura de multicomponentes, a taxa de difusão térmica da espécie m é determinada por

$$K_{T,m} = \sum_i^n K_{T,m_j} \quad (3.25)$$

Ao aplicar o processo de médias na equação da energia, semelhante ao feito na equação de movimento, surge um novo termo, $\bar{\rho} \overline{u'_j h'}$, resultado do escoamento turbulento. Este termo é conhecido como fluxo de calor de Reynolds e é definido [Libby e Willians, 1980]

$$F_{h,j} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \bar{\rho} \overline{u'_j h'} + \sum_m h_m \rho Y_m V_{m,j} \quad (3.26)$$

O método de modelagem da flutuação da entalpia estática h' será introduzido em breve.

3.1.5 – Conservação de Espécies Químicas

Para cada constituinte m de uma mistura de fluido, a concentração local é expressa com uma fração de massa Y_m e assumida como sendo a equação governante da conservação de espécies

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_m) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_m + \tilde{F}_{m,j}) = s_m \quad (3.27)$$

onde $\tilde{F}_{m,j}$ é a componente do fluxo difusivo instantâneo. Em analogia à equação da energia, o fluxo difusivo para um escoamento laminar é determinado a partir da lei de Fick,

$$\tilde{F}_{m,j} = \tilde{\rho} \tilde{Y}_m \tilde{V}_{m,j} \quad (3.28)$$

Ao considerar escoamentos turbulentos reativos, surge o termo de flutuação da fração mássica [Libby e Willians, 1980]

$$F_{m,j} = \rho Y_m V_{m,j} + \overline{\rho u'_j Y'_m} \quad (3.29)$$

onde o último termo representa o fluxo de massa, que será modelado na próxima seção.

3.2 Modelagem da Turbulência - RANS

Em função da complexidade do fenômeno em questão, especialmente quando considerado o escoamento em motores de combustão interna, devido à presença de separação do escoamento e alta variação do número de Reynolds em todo domínio computacional, optou-se por utilizar modelos de turbulência que buscam maior fidelidade nos resultados para dada situação. Portanto, o modelo utilizado é o modelo $k-\omega$ SST [Menter, 1993].

Uma vez que o presente trabalho emprega a metodologia RANS, no texto a seguir se realiza uma incursão descritiva sobre esta metodologia. Serão apresentadas, de forma sucinta, as equações de transporte dentro da formulação compressível, bem como as propriedades pertinentes aos modelos utilizados.

3.2.1 Modelos de Viscosidade Turbulenta - EVM

A primeira tentativa de modelar o tensor de Reynolds foi feita por Joseph Boussinesq (1842-1929). A hipótese de Boussinesq continua como ponto de partida para a maioria dos modelos de turbulência empregados atualmente.

Esta hipótese é baseada na analogia entre o processo de difusão molecular e o movimento turbulento. O Tensor de Reynolds e o fluxo escalar turbulento são diretamente conectados a gradientes locais do campo de velocidade média através da difusividade e viscosidade turbulenta. Ao longo dos anos, a hipótese de Boussinesq, em uma forma generalizada proposta por Kolmogorov, tem sido uma das metodologias mais empregadas para a previsão de escoamentos turbulentos [Silva Freire *et al.*, 2002]. Os constituintes relacionados a modelos de turbulência lineares [Launder e Spalding, 1974] são

$$-\bar{\rho} \overline{u'_i u'_j} = \mu_t S_{ij} - \frac{2}{3} \left(\mu_t \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \rho k \right) \delta_{ij} \quad (3.30)$$

$$\bar{\rho} \overline{u'_j h'} = -\frac{\mu_t}{\sigma_{h,t}} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (3.31)$$

$$\bar{\rho} \overline{u'_j Y'_m} = -\frac{\mu_t}{\sigma_{m,t}} \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \quad (3.32)$$

onde

$$k \equiv \frac{\overline{u'_i u'_i}}{2} \quad (3.33)$$

sendo k a energia cinética turbulenta, μ_t a viscosidade turbulenta, $\sigma_{h,t}$ e $\sigma_{m,t}$ são números de Prandtl turbulento. O tensor de deformação médio é definido como

$$S_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (3.34)$$

A viscosidade turbulenta é relacionada a k e ε (ε é a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta) como segue

$$\mu_t = f_\mu \frac{C_\mu \rho k^2}{\varepsilon} \quad (3.35)$$

onde C_μ é um coeficiente empírico, normalmente considerado como constante, f_μ é a função de amortecimento a ser definida para cada modelo individual. Portanto, seu valor depende da aproximação assumida, por exemplo: para aproximações de altos números de Reynolds seu valor é considerado 1. Em modelos lineares, o Tensor de Reynolds é uma combinação linear da viscosidade turbulenta e do gradiente de velocidade média.

3.2.1.1 Modelos EVM de Duas Equações

No campo da aplicabilidade das equações de Navier-Stokes para escoamentos turbulentos complexos, os modelos de turbulência de duas equações mais populares são os modelos $k-\varepsilon$ [Launder e Spalding, 1974] e $k-\omega$ [Wilcox, 1988]. Estes modelos resolvem duas equações de transporte, uma para a energia cinética turbulenta, k , outra equação é relacionada à escala de comprimento, ou tempo.

Nos escoamentos usuais em ICE, devido ao largo espectro de velocidades, em geometrias complexas que causam fortes efeitos tridimensionais, gradientes de pressão adversa, descolamentos, recirculações e escoamentos secundários, o modelo $k-\varepsilon$ linear apresenta deficiências. Neste âmbito surge o modelo $k-\omega$, que atende a física do fenômeno. Este modelo é ilustrado a seguir.

3.2.1.1.1 Modelo $k-\omega$ SST

O modelo $k-\omega$ proposto por Wilcox, 1988, difere do modelo $k-\varepsilon$ padrão por apresentar melhor reprodução do fenômeno em situações que contém separação de escoamento e gradiente de pressão adverso. Outra vantagem do modelo é o seu comportamento favorável próximo à parede. Ao comparar com resultados de uma simulação DNS, a equação da taxa de dissipação específica, ω , apresentou bons resultados quando integrada até a parede, associada à aproximação de baixo número de Reynolds [Wilcox, 2000].

A fim de utilizar propriedades favoráveis de ambos os modelos, $k-\varepsilon$ e $k-\omega$, Menter, 1993, propôs combinar estes dois modelos de tal forma que o modelo se reduz a $k-\omega$ próximo à parede e $k-\varepsilon$ distante dela. A combinação destes dois modelos foi implementada utilizando uma função de combinação, F (*blending function*), além de algumas funções empíricas. O modelo original é multiplicado por uma função F_1 , e o assim chamado modelo $k-\varepsilon$ transformado, por uma função $(1 - F_1)$, sendo ambos adicionados. A função F_1 é designada como 1 (um) na região próxima à parede, e como 0 (zero) distante dela. Este modelo, denominado $k-\omega$ SST é considerado a evolução do modelo original. Seus coeficientes são expressos da seguinte forma geral

$$C_\phi = F_1 C_{\phi 1} + (1 - F_1) C_{\phi 2} \quad (3.36)$$

sendo

$$F_1 = \tanh(\arg_1^4), \quad \arg_1 = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{0,09 \omega y}, \frac{500 \nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4 \rho k}{\sigma_{\omega 2}^{\omega} CD_{k\omega} y^2} \right] \quad (3.37)$$

$$CD_{k\omega} = \max \left(\frac{2\rho}{\omega \sigma_{\omega 2}^{\omega}} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 10^{-20} \right)$$

onde C_{ϕ_1} representa qualquer constante do modelo $k-\omega$ original ($\sigma_{k1}^{\omega}, \dots$), C_{ϕ_2} representa qualquer constante do modelo $k-\varepsilon$ transformado ($\sigma_{k2}^{\omega}, \dots$) e C_{ϕ} é a constante correspondente ao novo modelo $k-\omega$ SST (σ_k, \dots). Dessa maneira, dois conjuntos de constantes serão utilizado:

- Os Coeficientes do conjunto C_{ϕ_1} são dados pela Tabela 3.1 e Equação (3.38):

Tabela 3.1 - Coeficientes do conjunto C_{ϕ_1} para o modelo $k-\omega$ SST.

$\sigma_{k\phi_1}^{\omega}$	$\sigma_{\omega\phi_1}^{\omega}$	β_{ϕ_1}	$\beta_{\phi_1}^*$	κ
1,176	2,0	0,075	0,09	0,41

Menter, 1993.

$$\alpha_{\phi_1} = \frac{\beta_{\phi_1}}{\beta_{\phi_1}^*} - \frac{1}{\sigma_{\omega\phi_1}^{\omega}} \frac{\kappa^2}{\sqrt{\beta_{\phi_1}^*}} \quad (3.38)$$

- Os Coeficientes do conjunto C_{ϕ_2} são dados pela Tabela 3.2 e a Equação (3.39):

Tabela 3.2 - Coeficientes do conjunto C_{ϕ_2} para o modelo $k-\omega$ SST.

$\sigma_{k\phi_2}^{\omega}$	$\sigma_{\omega\phi_2}^{\omega}$	β_{ϕ_2}	$\beta_{\phi_2}^*$	κ
1,0	1,168	0,0828	0,09	0,41

Menter, 1993

$$\alpha_{\phi_2} = \frac{\beta_{\phi_2}}{\beta_{\phi_2}^*} - \frac{1}{\sigma_{\omega\phi_2}^{\omega}} \frac{\kappa^2}{\sqrt{\beta_{\phi_2}^*}} \quad (3.39)$$

em adição

$$S_\omega = 2(1-F_1) \frac{1}{\sigma_{\omega^2}} \frac{1}{\omega} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \frac{\partial k}{\partial x_j} \quad (3.40)$$

A viscosidade turbulenta para o modelo SST é

$$\mu_t = \frac{a_1 k}{\max\left(a_1 \omega, \sqrt{\frac{1}{2} \Omega_{ij} \Omega_{ij}} F_2\right)} \quad (3.41)$$

onde

$$a_1 = 0,31 \quad , \quad F_2 = \tanh(\arg_2^2) \quad , \quad \arg_2 = \max\left(2 \frac{\sqrt{k}}{0,09 \omega y}, \frac{500 \nu}{y^2 \omega}\right) \quad (3.42)$$

Por fim, a forma geral da equação de k e ω é a seguinte:

Energia cinética turbulenta:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j k - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] = \mu_t P - \rho \beta^* k \omega + \mu_t P_B \quad (3.43)$$

Taxa de dissipação específica:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j \omega - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] = \alpha \frac{\omega}{k} \mu_t P - \rho \beta \omega^2 + \rho S_\omega + C_{\varepsilon 3} \mu_t P_B C_\mu \omega \quad (3.44)$$

onde a taxa de dissipação específica é definida da seguinte forma

$$\omega = \frac{\varepsilon}{C_\mu k} \quad (3.45)$$

levando a

$$\varepsilon = \omega C_\mu k \quad (3.46)$$

que é usada para obter a viscosidade turbulenta definida na Equação (3.35).

Para o modelo $k-\omega$ SST, os coeficientes C_μ e $C_{\varepsilon 3}$, são coeficientes empíricos, cujos valores padrões são $C_\mu = 0,09$ e $C_{\varepsilon 3} = 0,0$ ou $1,44$ quando $P_B > 0$. Os termos P e P_B são dados pelas equações,

$$P \equiv S_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} ; \quad P_B \equiv -\frac{g_i}{\sigma_{h,t}} \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (3.47)$$

3.3 Aproximação de Baixo Número de Reynolds

As aproximações chamadas de altos números de Reynolds, e outras que requerem o uso de funções de parede, não lidam bem com escoamentos onde os efeitos da viscosidade molecular são importantes. Para tornar possível a integração das equações próximo à parede, modificações são necessárias para considerar os efeitos viscosos e também os efeitos de parede não viscosos. As primeiras modificações feitas nos EVM não distinguem entre efeitos viscosos e não viscosos na parede. Envolviam uma simples modificação da viscosidade unicamente no número de Reynolds turbulento local. Mais tarde, Jones *et al.*, 1973, realizaram a modificação das equações de transporte de k e ε .

Assim, a aproximação do tipo baixo Reynolds torna-se possível, em função da integração das equações de transporte até a parede. Para este procedimento, algumas mudanças nas equações que governam o modelo $k-\varepsilon$ necessitam ser realizadas, introduzindo uma função de amortecimento, f_μ , capaz de incluir na modelagem da turbulência o efeito da dissipação viscosa existente na proximidade da parede. Estas são geralmente funções não lineares e seu comportamento não pode ser facilmente controlado por técnicas convencionais de linearização. Dessa forma, podem interferir nas propriedades de convergência do esquema.

A função de amortecimento introduzida tanto para modelos $k-\varepsilon$ padrão linear ou não-linear assume a seguinte forma [Lien *et al.*, 1996]

$$f_\mu = \left[1 - e^{-0,0198R_{ey}} \right] \left(1 + \frac{5,29}{R_{ey}} \right) \quad (3.48)$$

onde

$$R_{ey} = \frac{y\sqrt{k}}{\nu} \quad (3.49)$$

onde y é a distância normal a partir da parede. O número de Reynolds turbulento, R_t , é formulado da seguinte maneira

$$R_t = \frac{k^2}{\nu \varepsilon} \quad (3.50)$$

A equação da taxa de dissipação específica (3.45) sofre modificações quando não se deseja utilizar um tratamento de parede para resolver a região viscosa. Dessa maneira, segundo Lien *et al.*, 1993, ela assume a seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j \varepsilon - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] = \\ C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \left\{ \mu_t (P + P_{NL} + P') - \frac{2}{3} \left(\mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \rho k \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right\} + C_{\varepsilon 3} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t P_B - \\ C_{\varepsilon 2} \left(1 - 0,3 e^{-R_t^2} \right) \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + C_{\varepsilon 4} \rho \varepsilon \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (3.51)$$

Os coeficientes $C_{\varepsilon 1}$ a $C_{\varepsilon 4}$ estão na Tabela 3.3, a viscosidade turbulenta é determinada pela Equação (3.35), o número de Reynolds turbulento é embasado pela Equação (3.50) e o termos adicionais P_{NL} e P' são representados pelas expressões

$$P_{NL} = -\frac{\rho}{\mu_t} \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \left[P - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\rho k}{\mu_t} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right] \quad (3.52)$$

e

$$P' = 1,33 \left[1 - 0,3 e^{-R_t^2} \right] \left[P + P_{NL} + 2 \frac{\mu}{\mu_t} \frac{k}{y^2} \right] e^{-0,00375 R_{ey}^2} \quad (3.53)$$

Tabela 3.3 - Coeficientes do modelo $k-\varepsilon$ e $k-\omega$.

C_μ	σ_k	σ_ε	σ_h	σ_m	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$	$C_{\varepsilon 4}$
0,09	1,0	1,22	0,9	0,9	1,44	1,92	0,0 ou 1,44 para $P_B > 0$	-0,33

Launder e Spalding, 1974; El Tahry, 1983.

A equação da taxa de dissipação não é resolvida na célula próxima à parede. Pelo contrário, a dissipação ε_p , na célula próximo à parede, é calculada com a seguinte relação

$$\varepsilon_p = \frac{2 \nu k}{y^2} \quad (3.54)$$

Por fim, para empregar esta metodologia é necessário um refinamento na região próxima da parede. Mais detalhes sobre esta particularidade e uma alternativa para não se torna tão dependente do refinamento é introduzido na seção seguinte.

3.4 Condição de Contorno do Escoamento Turbulento

Estas devem ser aplicadas na parede sólida e em situações onde existam entrada e saída de escoamento, sendo que particular atenção deve ser prestada para implementar as condições de contorno de parede e entrada. O tratamento destas condições, no presente trabalho, é apresentado a seguir.

3.4.1 Condição de Contorno na Parede

Para as condições de contorno na parede, quatro alternativas de não-deslizamento estão disponíveis [Star-cd, 2014a]:

- Aproximações de duas-camadas e aproximações de baixo número de Reynolds, onde as condições de não-deslizamento são aplicadas diretamente na camada limite, as quais são computadas resolvendo as equações do modelo de turbulência, massa e momento.
- Aproximações de alto número de Reynolds, que utilizam função de parede, onde relações algébricas são assumidas para o cálculo da distribuição de velocidade, temperatura e parâmetros da turbulência em toda a camada limite. Comparado

com as soluções de baixo número de Reynolds, esta aproximação possui menos fundamentação no ponto de vista teórico e fornece resultados inferiores em situações particulares. Contudo, é muito utilizada porque permite um menor refinamento da malha próximo à parede e, portanto, um inferior tempo computacional.

- Condição de contorno híbrida, onde o tratamento próximo à parede é aplicado para modelos de turbulência que utilizam aproximações de baixo número de Reynolds. Este tratamento fornece condições de contorno válidas para a quantidade de movimento, turbulência, energia e espécies químicas, para uma grande faixa de densidades de malha próximo à parede.

A condição de contorno na parede utilizada neste estudo foi a aproximação de baixo número de Reynolds com seu tratamento híbrido. Mais detalhes sobre suas formulações são apresentados abaixo.

3.4.1.1 Condição de Contorno na Parede com Tratamento Padrão - Aproximação de Baixo Número de Reynolds

A região próxima à parede é tratada da mesma forma que o escoamento no interior, com a condição de não-deslizamento imposta na face da célula limite. A única diferença é que no centroide C da célula próximo à parede (Figura 3.2), o valor de ε é dado por

$$\varepsilon_C = \left[\frac{\mu_t}{\rho} (P + P_{NL}) + \varepsilon_p \right]_C \quad (3.55)$$

onde P e P_{NL} são dados pela Equação (3.47) e (3.52) e ε_p pela Equação (3.54). A correspondente expressão é ajustada para o modelo $k-\omega$, onde a equação para o cálculo da primeira célula assume a seguinte forma

$$\omega_C = \frac{60\nu}{\beta_1 y_C^2} \quad (3.56)$$

Na Equação (3.56), y_C é a distância mostrada na Figura 3.2 e $\beta_1 = 0,075$, enquanto que u_w é a velocidade tangencial da parede. O refinamento da malha na direção normal à parede

deve ser suficiente para que o valor de y^+ corresponda ao centroide da célula próximo à parede de aproximadamente 1.

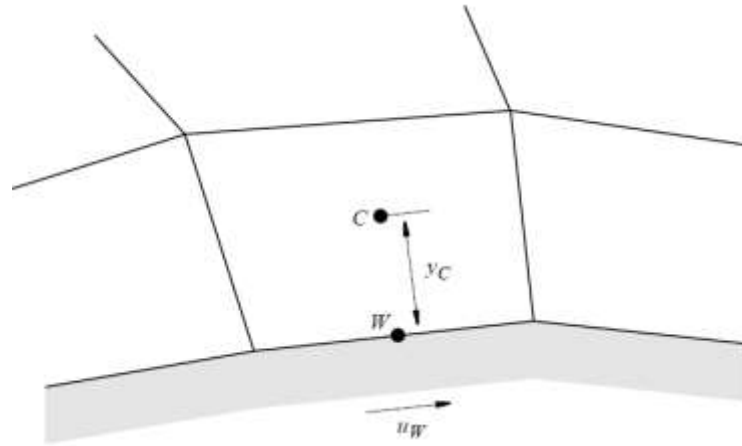


Figura 3.2 - Ilustração da célula próxima à parede [Star-cd, 2014a].

3.4.1.2 Condição de Contorno na Parede com Tratamento Híbrido

É aplicada apenas para modelos de turbulência que utilizam aproximações de baixo número de Reynolds, e dispensa a obrigatoriedade de ter que gerar um elevado refinamento próximo à parede para atender o y^+ . O valor do y^+ da condição de contorno híbrida é alcançado utilizando uma expressão assintótica, válida para $0,1 < y^+ < 100$, por uma combinação de expressões de baixo e alto número de Reynolds. O fator de combinação, ζ , é baseado no valor de y^+ , onde é estimado utilizando uma expansão assintótica de quarta ordem [Star-cd, 2014a], conforme mostrado a seguir

$$y^+ = u^+ + \frac{1}{E} \left(e^{\kappa u^+} - 1 - \kappa u^+ - \dots - \frac{(\kappa u^+)^4}{4!} \right) \quad (3.57)$$

$$\zeta = \left(1 - e^{-y^+ / y_m^+} \right)^2 \quad (3.58)$$

onde E é um coeficiente empírico com valor $E = 9,0$, u^+ é a velocidade adimensional definida como $u^+ = (u - u_w) / u_\tau$, sendo que $u_\tau = (\tau_w / \rho)^{1/2}$ e y_m^+ é dado pela equação

$$y_m^+ - \frac{1}{\kappa} \ln(E y_m^+) = 0 \quad (3.59)$$

Mais detalhes sobre a implementação numérica desta condição são encontrados em Rung, 1999.

3.4.2 Condição de Contorno de Entrada

A energia cinética turbulenta k é algumas vezes disponível de medições, podendo-se determinar as tensões normais turbulentas. Na ausência deste dado, valores admissíveis podem ser assegurados para $\overline{u'^2}$, via estimativa de uma intensidade turbulenta local, definida como [Star-cd, 2014]

$$I \equiv \frac{\sqrt{\overline{u'^2}}}{U} \quad (3.60)$$

onde U é a magnitude da velocidade média ou média local na condição de contorno. A intensidade turbulenta normalmente é menor do que 1, mas seu valor depende de aplicações particulares. Outra grandeza importante que deve ser estimada é a escala de comprimento da turbulência, l , normalmente definida da seguinte forma [Launder e Spalding, 1974]:

$$l = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \quad (3.61)$$

3.5 Modelos de Combustão para Motores de Combustão Interna

Tendo-se apresentado anteriormente as equações de conservação da massa, quantidade de movimento, energia e espécies químicas, agora a atenção é voltada para a modelagem do processo de combustão em motores. A modelagem da combustão pré-misturada é abordada mediante a utilização de equações diferenciais parciais e de diferenciais estocásticas, que descrevem a evolução temporal e espacial adotando a média de *Favre* [Star-cd, 2014a ; Kuo, 1989] (para as equações de transporte das frações de massa) e média *ensemble* [Star-cd, 2014a; Silva Freire, 2002]. Os regimes de aplicações para a combustão turbulenta pré-

misturada podem ser representados pelo diagrama de *Borghi*, mostrado na Figura 3.3, que define os modos possíveis de interação entre as estruturas turbulentas e da chama. As possibilidades de interação são definidas pelas escalas características de comprimento e tempo da turbulência e combustão. Normalmente, o regime da estrutura da chama turbulenta é determinado comparando estas escalas. Para o estudo de motores com ignição por centelha dois regimes são importantes: regime de chamas corrugadas (*corrugated flamelets*) e o regime de zona de reação fina (*thin reaction zones*) [Peters, 2000].

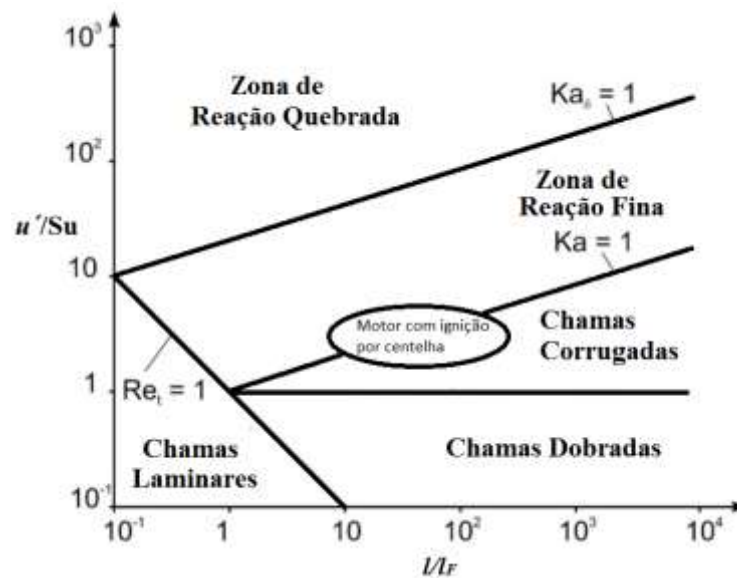


Figura 3.3 – Diagrama de regimes para a combustão turbulenta pré-misturada [adaptado de Peters, 2000].

No diagrama, a abcissa representa a razão l/l_F interpretada como uma medida das escalas de comprimento integral do movimento turbulento l , que interage com as chamas de espessura de uma chama laminar l_F . A ordenada mostra a razão entre a intensidade turbulenta u' e a velocidade de chama laminar S_u . A relação entre as escalas é representada pelo número de Karlovitz, Ka ,

$$Ka = \frac{l_F^2}{\eta^2} \quad (3.62)$$

onde η é a escala de comprimento de Kolmogorov. Quando $Ka = 1$ implica que a espessura da chama é igual à escala de comprimento de Kolmogorov. Esta situação é chamada de critério de Klimov-Willians. Para $Ka < 1$ a espessura da chama (l_F) é menor que a escala de

Kolmogorov (η), ou seja, a estrutura inteira da chama é incorporada dentro da estrutura de Kolmogorov. Os modelos para o processo de combustão em ICE baseiam-se no pressuposto do elemento de chama (*flamelet* – a partir deste ponto será utilizado este termo), que considera a chama como uma pequena estrutura, onde as menores escalas do escoamento (Kolmogorov) são muito maiores que a espessura do elemento da chama. Esta hipótese garante que o *flamelet* se estabeleça em escalas nas quais o escoamento pode ser considerado laminar. A composição química entre os gases não queimados e queimados é separada por uma fina espessura de *flamelets*, onde o efeito da turbulência é apenas o de causar o enrugamento da chama, enquanto que a estrutura da chama no interior não é significativamente alterada pelo escoamento turbulento, ou seja, a turbulência apenas transporta os *flamelets*, mas não altera sua estrutura [Peters, 2000]. Atribuindo estas considerações, pode-se desacoplar o fenômeno químico do escoamento turbulento e, assim, reduzindo o problema da modelagem da combustão pré-misturada, por exemplo, a determinação de uma equação de transporte para área da superfície da chama. Para esta hipótese a taxa de reação ou taxa de massa queimada é definida da seguinte forma

$$\dot{\omega}_{Fu} = A_f S_u \rho_u \quad (3.63)$$

onde A_f a área da superfície da chama, ρ_u é a massa específica do gás não queimado.

Um dos modelos que utiliza estas considerações é o modelo de chama coerente (CFM). O modelo CFM utiliza a equação de balanço para descrever a produção, destruição, difusão e advecção da área da superfície da chama em um escoamento reativo turbulento. O modelo CFM possui a limitação de apenas considerar a combustão na forma homogênea. Processos que envolvam a combustão heterogênea são modelados pelos modelos denominados ECFM e ECFM-3Z. Estes modelos são considerados uma extensão do modelo CFM, onde pode ser considerada a admissão de ar separado da injeção de combustível e, durante a evolução do escoamento, a mistura ar-combustível é caracterizada. Em se tratando de um motor de ignição por centelha, para ambos os modelos o tratamento da ignição deve ser resolvido, permitindo a inicialização do modelo de combustão turbulenta, a qual requer que a chama seja resolvida no tempo e no espaço.

Neste âmbito, nas seções seguintes serão especificados os modelos de combustão para motores com ignição por centelha e suas formulações. A combinação das formulações das

médias de *Favre* e *ensemble* são aplicadas para as equações instantâneas. As médias de *Favre* são aplicadas apenas para as equações de transporte das frações mássicas, Y .

3.5.1 Modelo CFM-ITNFS

Este modelo utiliza uma equação de balanço para a área da superfície da chama para descrever o seu transporte pelo escoamento turbulento, assim como os mecanismos físicos que produzem e destroem a superfície reativa. Portanto, a variável que descreve a distribuição da chama é a densidade da área da chama, Σ , definida como

$$\Sigma = \Sigma' = \lim_{\delta V \rightarrow 0} \frac{\delta A_f}{\delta V} \quad (3.64)$$

onde Σ' é a média da flutuação da densidade de área da chama, δA_f é a área da chama e δV o volume no qual ela está contida, ambos definidos em médias *ensemble*. A equação de balanço para a densidade da área da superfície da chama, a partir da equação de transporte do escalar Σ é proposta de duas formas. A primeira definição da equação de transporte é [Candel e Poinso, 1990; Pope, 1988; Trouvé, 1992]

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle w_f \rangle_s \Sigma) = \langle K_T \rangle_s \Sigma + 2 \langle K_C S \rangle_s \Sigma \quad (3.65)$$

sendo que w_f é a velocidade total da superfície, K_T é a taxa de deformação da chama, K_C representa a curvatura da chama e S a superfície da chama. Os termos entre $\langle \rangle_s$ indicam que são relativos a uma média da superfície.

A segunda definição é sugerida por Boudier *et al.*, 1992, e Trouvé, 1992, através da equação de transporte da superfície da chama

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (u \Sigma) - \nabla \cdot (\Gamma_\varepsilon \nabla \Sigma) = \alpha K_t \Sigma - \beta \frac{\rho_u Y_{Ft} S_u (1 + a \sqrt{k} / S_u)}{\rho Y_F} \Sigma^2 \quad (3.66)$$

onde K_t é o estiramento líquido da chama turbulenta (*net flame stretch*), Γ_ε é uma função do modelo ITNFS (*Intermittent Turbulent NetFlame Stretch*) em relação à difusão da superfície, k a energia cinética turbulenta, Y_{Ft} é a fração mássica total de combustível (parte de uma

condição inicial sendo possível a variação de ciclo a ciclo) e α e β são coeficientes do modelo com valores sugeridos por Boudier *et al.*, 1992: $\alpha = 2,1$; $\beta = 1,0$ e $a = 0,1$. O subscrito u indica que é gás não queimado. O primeiro termo do lado direito da Equação (3.66) representa o aumento da área da chama devido à combinação do efeito de taxa de deformação e curvatura, e o segundo termo indica a diminuição da área da superfície da chama devido ao consumo de combustível. Neste último termo existe a dependência da velocidade de chama plana laminar sem deformação (chama adiabática), S_{u0} , definida por correlações empíricas. Uma possível correlação é proposta por Metghalchi e Keck, 1982

$$S_u = S_{u0} \left(\frac{T_u}{T_0} \right)^\alpha \left(\frac{P}{P_0} \right)^\beta \quad (3.67)$$

onde o subscrito 0 representa as propriedades de referência. A velocidade de chama laminar de referência, S_{u0} , e os expoentes α e β dependem da razão de equivalência, ϕ , da mistura definida como a razão entre a mistura combustível-ar real e a mistura combustível-ar estequiométrico.

Outra correlação para a velocidade de chama laminar foi proposta por Gülder, 1990, definida da seguinte forma

$$S_u = ZW\phi^\eta \exp\left[-\xi(\phi-1,075)^2\right] \left(\frac{T}{T_0} \right)^\alpha \left(\frac{P}{P_0} \right)^\beta \quad (3.68)$$

onde Z , W , η , ξ , α e β são constantes dependentes do combustível utilizado. A Tabela 3.4 ilustra os valores destas constantes, para alguns combustíveis de interesse.

Tabela 3.4 - Coeficientes em relação aos combustíveis

Combustível	Z	W	η	ξ	α	β	
						$\phi < 1$	$\phi > 1$
Metano	1	0,422	0,15	5,18	2,00	-0,5	
Propano	1	0,446	0,12	4,95	1,77	-0,2	
Metanol	1	0,492	0,25	5,11	1,75	$-0,2/\sqrt{\phi}$	$-0,2\phi$
Etanol	1	0,465	0,25	6,34	1,75	$-0,17/\sqrt{\phi}$	$-0,17\phi$
Iso-octano	1	0,4658	-0,326	4,48	1,56	-0,22	

Gülder, 1990.

Entre as duas formulações para a velocidade da chama plana laminar, a primeira correlação está limitada para aplicações em que a ϕ está próximo de 1, já a segunda possui maior aplicação e é recomendada para aplicações gerais [Star-cd, 2014a].

A temperatura do gás não queimado é calculada através da equação de transporte da sua entalpia específica (visto na Seção 3.1.4). Alternativamente, a temperatura dos gases não queimados pode ser determinada, inicialmente, por uma relação isentrópica baseada nos valores de pré-ignição de T e p , da seguinte forma

$$T_u = T_0 \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \quad (3.69)$$

O estiramento da chama é calculado a partir do modelo ITNFS proposto por Weller *et al.*, 1994. Este modelo se baseia em dados experimentais e simulações numéricas diretas (DNS) para o escoamento, determinando assim a distribuição do estiramento ao longo da frente de chama. A partir desta interação vórtice-chama, foi construída uma biblioteca de funções para o estiramento líquido da chama turbulenta, K_t . Devido à complexidade da aplicação destas funções [Weller *et al.*, 1994] foi ajustada uma função de estiramento líquido de chama que envolve os seguintes parâmetros

$$\Gamma_k = \frac{K_t}{\varepsilon/k} = f \left(\frac{u}{S_u}, \frac{l}{\delta_l} \right) \quad (3.70)$$

sendo l a escala de comprimento da turbulência (definida pela Equação (3.61)) e δ_l a espessura térmica laminar da chama, calculada da seguinte forma [Blint, 1986]

$$\delta_l = 2 \frac{\mu_b}{\text{Pr} \rho_u S_u} \quad (3.71)$$

onde o número de Prandtl Pr refere-se ao gás não queimado, e tem o valor constante de 0,9. O termo μ_b é a viscosidade molecular do gás queimado, calculado a partir da lei de Sutherland

$$\mu_b = \frac{\mu_1 T_b^{1.5}}{\mu_2 + T_b} \quad (3.72)$$

onde μ_1 e μ_2 são coeficientes com valores de $1,457 \times 10^{-6} \text{ kgm}^{-2}\text{K}^{-1.5}$ e 110 K , respectivamente.

3.5.1.1 Tratamento da Ignição

O tratamento da ignição para o modelo CFM-ITNFS é uma versão simplificada da aproximação proposta por Boudier *et al.*, 1992. No modelo original, o período de ignição é tratado como duas etapas distintas. Na primeira fase, uma descarga elétrica ocorre no eletrodo e calor é transferido para a mistura no ponto de ignição, formando um núcleo esférico (*kernel*; a partir deste ponto será utilizado o termo *kernel* para indicar o núcleo da chama) com uma rápida expansão da zona de reação. A velocidade de propagação aumenta de forma que seu valor mínimo se aproxima assintoticamente da velocidade laminar de chama, para uma chama plana não estirada, definida da seguinte forma

$$S_{u\infty} = \frac{T_b}{T_u} S_u \quad (3.73)$$

O crescimento do *kernel* durante a primeira fase é assumido como laminar, esférico (simétrico) e como um escoamento a pressão constante. Segundo Boudier *et al.*, 1992, a modelagem é considerada laminar devido à grande quantidade de energia liberada pela centelha na fase inicial, impedindo qualquer efeito significativo da turbulência. Durante esta fase a chama não é considerada como relevante, e a propagação do *kernel* é calculada a partir da equação diferencial ordinária simples

$$\frac{dr}{dt} = \frac{T_b}{T_u} S_u \quad (3.74)$$

Quando a velocidade de propagação no *kernel* atinge o valor de $S_{u\infty}$, o primeiro critério é atingido, e denominado primeiro tempo de transição, t_1 , onde a dimensão do *kernel* atinge o valor r_1 (o raio do *kernel* possui um valor constante e prescrito).

Durante o segundo estágio, assume-se que a zona laminar de reação do *kernel* ainda se propaga com a velocidade da chama laminar, mas simultaneamente a chama é enrugada pela

turbulência. A área da superfície da chama nesta etapa é a soma da área laminar esférica do *kernel* e a área do enrugamento. A taxa de aumento da área do *kernel* é calculada da seguinte forma

$$\frac{dA_k}{dt} = \frac{d}{dt}(4\pi r^2(t)) + (\alpha K_t A_k) \quad (3.75)$$

onde A_k é a área do *kernel*. O primeiro termo do lado direito da Equação (3.75) representa a taxa de aumento da superfície do *kernel* devido à propagação laminar, e o segundo termo é a taxa de aumento de área em função do estiramento turbulento definido na Equação (3.70). As condições iniciais necessárias para as Equações (3.74) e (3.75) são

$$r(t_1) = r_1 \quad ; \quad A_k(t_1) = 4\pi r_1^2 \quad (3.76)$$

A segunda etapa chega ao fim quando o critério é alcançado, ou seja, definido como segundo tempo de transição, t_2 , o valor do estiramento laminar, K_l , deve ser menor que o valor do estiramento turbulento K_t

$$K_l = \frac{1}{A_{kl}} \frac{dA_{kl}}{dt} = \frac{2}{r} \frac{dr}{dt} \quad (3.77)$$

onde A_{kl} é a área do *kernel* para o estiramento laminar. Portanto, quando K_l estiver abaixo do valor de K_t a segunda etapa é concluída.

A última operação da modelagem é definir a variável Σ para a área da chama por unidade de volume. Assumindo que $t = t_2$, tem-se para Σ

$$\Sigma(r, t_2) = \frac{A_2}{\Omega_\infty} \left\{ 1 - \operatorname{erf} \left(\frac{|r - r_2|}{2l_2} \right) \right\} \quad (3.78)$$

sendo que Ω_∞ é o volume normalizado e definido como

$$\Omega_\infty = \int_0^\infty 4\pi u^2 \left\{ 1 - \operatorname{erf} \left(\frac{|u - r_2|}{2l_2} \right) \right\} du \quad (3.79)$$

assim assegurando que, na segunda transição de tempo t_2 , há um domínio infinito

$$A_2 = \int_0^{\infty} 4\pi u^2 \Sigma(u, t_2) du \quad (3.80)$$

Por fim, a quantidade l_2 da Equação (3.78) é a escala de comprimento difusivo no tempo t_2 , definida como

$$l_2(t) = \sqrt{\frac{\nu_t}{\sigma_\Sigma} (t_2 - t_1)} \quad (3.81)$$

onde ν_t é a viscosidade cinemática e σ_Σ é o número de Schmidt da Equação (3.81).

Segundo Boudier *et al.*, 1992, assume-se que o *kernel* da ignição não influencia no escoamento para o interior do cilindro e no campo de temperatura durante o processo. O t_2 e a área do *kernel* no tempo são utilizados como condição inicial para o modelo de combustão turbulenta pré-misturada. Desta implementação, em relação ao utilizado no programa Star-cd, o que difere é apenas a primeira fase do fenômeno. O crescimento do *kernel* não é calculado, assim o valor do diâmetro do *kernel* esférico laminar deve ser prescrito (tipicamente 2 mm), sendo assumido após a centelha em um dado tempo t_1 . Este tempo depende de diversos parâmetros, tais como: sistema de ignição do motor, condições do escoamento e termodinâmica ao redor do eletrodo, geometria do eletrodo, entre outros. Tipicamente é recomendado $t_1 \sim 0,1-0,2 \text{ ms}$ [Star-cd, 2014]. Portanto, é suficiente especificar apenas a localização que acontecerá a centelha, sendo o tamanho do volume de ignição implicitamente prescrito. Isso implica que somente uma ignição pode ser simulada, ou seja, este tratamento não pode ser utilizado em motores que possuem mais de uma ignição por cilindro.

3.5.2 Modelos de Combustão Avançados

No estudo numérico de motores busca-se, sempre que possível, a compreensão de todos os processos físicos envolvidos, tais como a mistura turbulenta de ar e combustível, formação e destruição de poluentes, a influência dos gases de exaustão recirculados (EGR) nas emissões de poluentes para a atmosfera, entre outros. Estes fenômenos podem ser

captados com a implementação de dois modelos de combustão que são um avanço do modelo CFM-ITNFS, denominados de ECFM e ECFM-3Z. Além da aplicabilidade apresentada na seção anterior, os novos modelos incluem as opções de combustão turbulenta pré-misturada com alimentação heterogênea e combustão não misturada (difusiva). A versão ECFM-3Z possui aplicações em todos os regimes, ou seja, adiciona, além dos processos citados acima, a simulação de motores HCCI (*Homogeneous Charge Compression Ignition*) e o modelo de duplo atraso (*double-delay*). Estes modelamentos não estão disponíveis nos modelos CFM-ITNFS e ECFM. Realizando uma comparação entre os modelos CFM, ECFM e ECFM-3Z, o último oferece um nível adicional de refinamento envolvendo a modelagem entre ar e combustível. Também, a composição de EGR assume as espécies de N_2 , CO_2 , H_2O , NO , CO , H_2 e fuligem, enquanto que a formulação ECFM apenas as parcelas de N_2 , CO_2 e H_2O para a mistura EGR. Segundo Colin e Benkenida, 2004, o modelo ECFM-3Z possui maior acuracidade devido a melhor representação das misturas. Este modelo será utilizado para modelar o processo de combustão no presente trabalho.

3.5.2.1 Modelo ECFM-3Z

No modelo de combustão ECFM-3Z, a mistura de gases é definida no espaço 2D, simultaneamente, em termos da fração de mistura (Z) e da variável de progressão da reação (\tilde{c}) para dois estados dos gases durante a combustão: gases não queimados e gases queimados, representados pelos índices u e b , respectivamente. A implementação na célula computacional é apresentada na Figura 3.4. Cada célula é dividida em três zonas (refere-se ao termo 3Z), por exemplo para a região de gases não queimados, a zona do combustível não misturado, F^u , a zona do ar não misturado mais a parcela de EGR, A^u , e a zona dos gases misturados, M^u , isto é, o produto da mistura entre o combustível não misturado, o ar não misturado e o EGR. A zona de mistura é o resultado da mistura turbulenta e molecular entre os gases das outras duas zonas e é onde a combustão ocorre.

De um modo geral, a implementação da variável Z é representada por uma função de densidade de probabilidade (PDF) através do termo de frações condicionais médias para a espécie i

$$Y_i^M = Y_i|_{Z=Z^M} = \int_{\delta V} Y(x,t) \delta[Z(x,t) - Z^M] dV \quad (3.82)$$

onde o índice M representa a zona de mistura, Z^M é a fração média da mistura e δ é a função delta de Dirac. Esta relação permite determinar a progressão da transferência do ar e combustível não misturados na região de mistura.

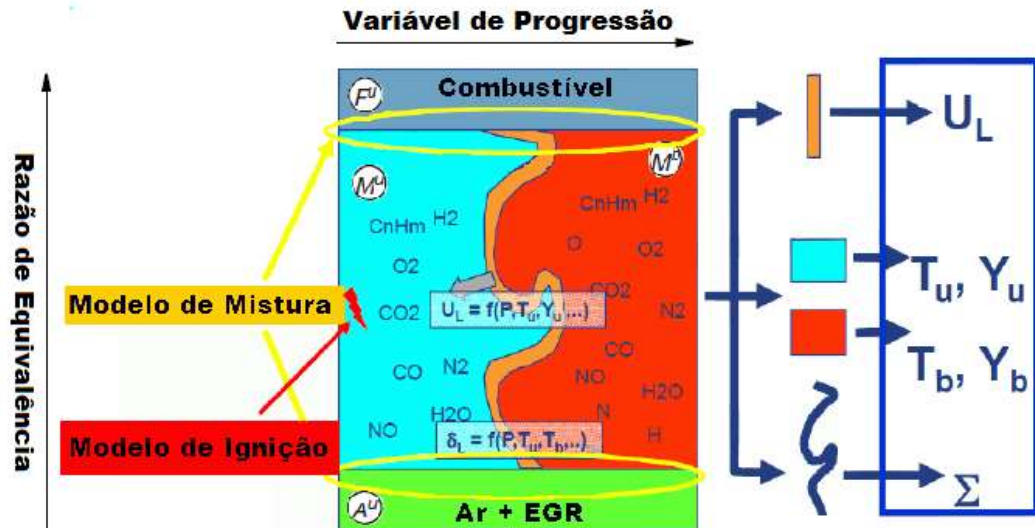


Figura 3.4 – Esquema da representação na célula computacional [modificado de Colin e Benkenida, 2004].

A representação dos gases queimados ou não queimados é indicada pela variável de progressão, \tilde{c} , que assume o valor de zero quando a massa de gás queimada é zero e seu valor é igual a 1 quando apenas existem gases queimados. O modelo ECFM-3Z é baseado na aproximação que a chama pode ser vista como uma interface de reação infinitamente fina, separando os gases não queimados dos queimados, onde cada espécie dos gases não queimados é consumida proporcional a sua fração mássica pela propagação da chama. Assim, a conservação de massa através da frente de chama permite a fração de massa dos gases queimados local ser proporcional à fração de massa do combustível que tenha oxidado desde o início da combustão. Esta relação é definida pela variável de progressão

$$\tilde{c} = 1 - \frac{(Y_{Fu}^u)}{(Y_{TFu})} \quad (3.83)$$

onde Y_{Fu}^u é a fração de massa de combustível não queimado e Y_{TFu} é a fração de massa de combustível traçada (*fuel tracer mass fraction*) após a combustão.

3.5.2.1.1 Evolução de (Z, \tilde{c}) durante a Combustão

Visando descrever como as diferentes zonas evoluem durante a combustão, considere uma chama pré-misturada separada em gases não queimados e queimados (como ilustrado na Figura 3.4). A ignição é iniciada através do modelo de ignição permitindo, inicialmente, determinar precisamente a superfície da chama. Após a ignição, o modelo de propagação de chama resolve a evolução da superfície da chama a partir da equação de transporte de densidade da superfície da chama que consumirá os gases não queimados, região M^u , formando gases queimados presentes na região M^b . A Figura 3.5 ilustra a evolução da combustão. Se a razão de equivalência é diferente de 1 ($\phi \neq 1$), haverá a formação das regiões de combustível queimado, F^b , e ar mais a parcela de EGR queimado, A^b . Embora essas duas regiões utilizem o superíndice b , elas não correspondem a gases queimados, mas à parcela remanescente de gases não queimados após a combustão que irão se misturar com os gases queimados. Este processo de mistura é realizado pela implementação de um modelo de mistura.

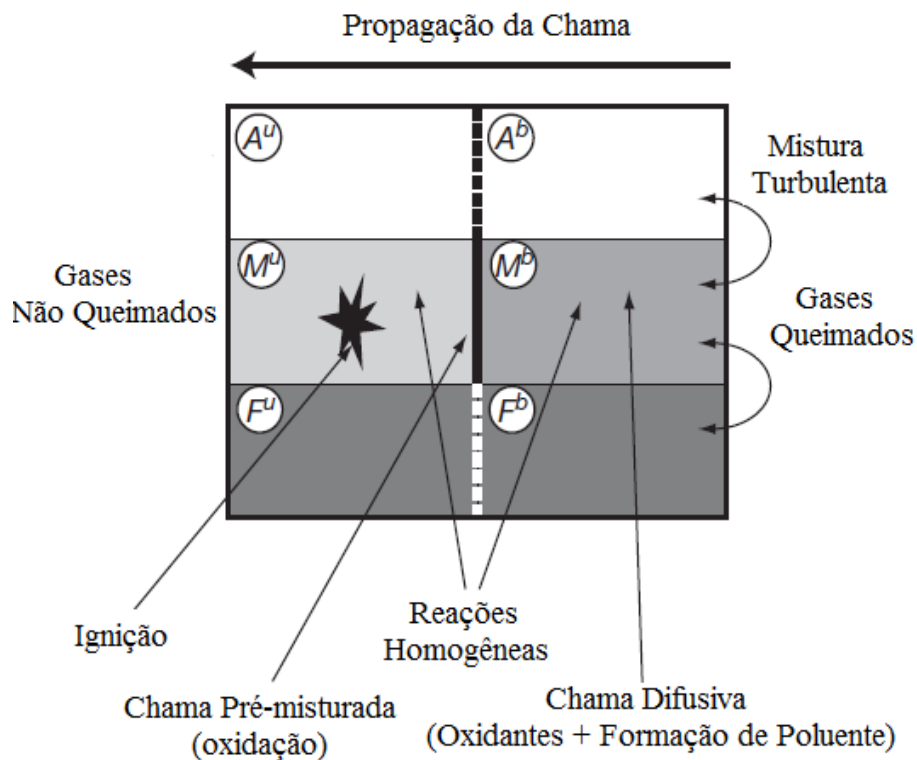


Figura 3.5 – Evolução da combustão pré-misturada [Colin e Benkenida, 2004].

Na região de gases queimados (M^b), o modelo de pós-chama e emissões é computado e permite determinar a temperatura dos gases nesta região e estimar as concentrações de

espécies dos poluentes. Com base na descrição da evolução da combustão, Colin e Benkenida, 2004, propõem que o modelo ECFM-3Z consiste de quatro principais etapas:

- Modelo de mistura;
- Modelo de ignição;
- Modelo de propagação de chama;
- Modelo de pós-chama e emissões.

Estas etapas serão apresentadas nas próximas seções com o objetivo de descrever os princípios dos modelos empregados.

3.5.2.1.2 Modelo de Mistura

Todas as espécies químicas no modelo ECFM-3Z (combustível, O₂, CO₂, H₂O, N₂, CO, H₂, OH, H, N, O, fuligem) são acondicionadas na zona de mistura. As outras duas zonas compreendem a parcela de combustível não misturado, representado pelas regiões F^u e F^b , e a zona de oxigênio não misturado, regiões A^u e A^b . As equações de transporte para a fração mássica de combustível e oxigênio totais são resolvidas pelas expressões abaixo, enquanto que as outras espécies são relacionadas algebricamente [Colin e Benkenida, 2004].

$$\frac{\partial \rho Y_{Fu}^F}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u Y_{Fu}^F) - \nabla \cdot \left[\left(D + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_{Fu}^F \right] = - \frac{\beta_m}{\tau_m} Y_{Fu}^F \left(1 - Y_{Fu}^F \frac{\rho}{\rho_u} \frac{M^M}{M_{Fu}} \right) + \dot{\omega}_{evap} \quad (3.84)$$

e

$$\frac{\partial \rho Y_{O_2}^A}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u Y_{O_2}^A) - \nabla \cdot \left[\left(D + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_{O_2}^A \right] = - \frac{\beta_m}{\tau_m} Y_{O_2}^A \left(1 - \frac{Y_{O_2}^A}{Y_{O_2}^\infty} \frac{\rho}{\rho_u} \frac{M^M}{M_{O_2}} \right) \quad (3.85)$$

onde Y_{Fu}^F é a fração de massa total do combustível ($Y_{Fu}^u + Y_{Fu}^b$), $Y_{O_2}^A$ a fração de massa total de oxigênio ($Y_{O_2}^u + Y_{O_2}^b$), M^M , M_{Fu} e M_{O_2} são as massas molares dos gases médios na região de mistura, combustível e oxigênio, respectivamente, β_m é o coeficiente de ajuste com valor

padrão de 1,0, τ_m é a escala de tempo da mistura considerada proporcional à escala de tempo da turbulência ($\tau_m \equiv k/\varepsilon$), $\dot{\omega}_{evap}$ é o termo fonte de evaporação para produção mássica de combustível gasoso e a concentração de oxigênio na mistura de ar, enquanto que $Y_{O_2}^\infty$ é definido por

$$Y_{O_2}^\infty = \frac{Y_{TO_2}}{(1 - Y_{TFu})} \quad (3.86)$$

e $Y_{TO_2}^\infty$ é a fração mássica de oxigênio traçado.

As espécies determinadas no espaço médio são transformadas para espécies correspondentes no espaço da mistura, pela definição de fração de massa genérica de uma espécie i

$$Y_{Ti}^M = (Y_{Ti} - Y_{Ti} C_x) \frac{\rho}{\rho - \rho_u^M} \quad (3.87)$$

sendo ρ_u^M a massa específica do gás na zona não misturada, dada por

$$\rho_u^M = \rho [C_x (Y_{TO_2} + Y_{TH_2} + Y_{TNO} + Y_{Tfuligem} + \dots) + Y_{Fu}^M] \quad (3.88)$$

e C_x a razão de coeficientes da zona não misturada para massas médias

$$C_x = \frac{Y_{O_2}^A}{Y_{TO_2}} = \frac{Y_i^A}{Y_{Ti}} \quad (3.89)$$

onde Y_i^A é a fração de massa da espécie i na zona não misturada e Y_{Ti} é a fração de massa traçada da espécie i . No modelo ECFM-3Z os estágios de combustão, propagação da chama, ignição e pós-chama são calculados com base nos gases na zona de mistura.

3.5.2.1.3 Modelo de Ignição

O modelo de ignição do ECFM-3Z divide-se em dois estágios. O primeiro estágio é a modelagem simples de um atraso (*delay*) entre a centelha e o aparecimento da superfície da chama, utilizando uma função I que inicia com valor de 0 e eventualmente atinge o valor de 1. Dessa forma, a função $I(t)$ é governada pela equação [Colin e Benkenida, 2004]

$$\frac{dI}{dt} = A1_{igni} \frac{(\rho^*)^{A2_{igni}}}{\tau_f} \quad (3.90)$$

onde ρ^* é a razão entre a densidade do gás no instante da ignição e a densidade do ar a pressão de 1 bar e temperatura de 300 K, τ_f é definido por $\tau_f = U_l/\delta_l$ e $A1_{igni}$ e $A2_{igni}$ são parâmetros de ajustes com valores padrões de 1,0 e 3,0, respectivamente. A velocidade da chama laminar efetiva, U_l , definida como $U_l = S_l Q_l$, onde Q_l é o fator de correção em função do efeitos de perda de calor e S_l é a velocidade da chama teórica, escrita como [Metghalchi e Keck, 1982]

$$S_l(\phi) = S_{lo} \left(\frac{T_u}{T_0} \right)^a \left(\frac{p}{p_0} \right)^b \max \left[1 - U_{lam1} X_{res}, \exp(U_{lam2} X_{res}) \right] \quad (3.91)$$

e

$$b = b_0 - 0,08 \left(\frac{p}{U_{lam3}} \right) \quad (3.92)$$

onde S_{lo} , a e b_0 são coeficientes que dependem do combustível utilizado em relação à razão de equivalência, U_{lam1} , U_{lam2} e U_{lam3} são três parâmetros com valor padrão de 2,1, -3,0 e 40,0, respectivamente.

Quando $I = 1$, a superfície da chama esférica é desenvolvida com raio R_k

$$R_k = \min \left[15 F_{actker} \delta_l \frac{T_b}{T_u}, R_{klimit} \right] \quad (3.93)$$

sendo que F_{actker} e R_{klimit} são parâmetros de ajuste, com valores de 1,0 e 1×10^{20} m, respectivamente.

O segundo estágio é responsável pelo desenvolvimento da superfície da chama nos gases médios. A superfície da chama, Σ_{init} , é desenvolvida através do domínio computacional a partir da seguinte expressão

$$\int_V \Sigma_{init} dV = D_{facig} 4\pi R_k^2 \quad (3.94)$$

onde D_{facig} é um fator definido através da seção do ângulo do eixo de manivelas (θ), da forma $D_{facig} = \theta/360$. Esta superfície da chama desenvolvida é adicionada à superfície da chama existente.

3.5.2.1.4 Modelo de Propagação da Chama

A fase da propagação da chama é modelada pela equação de transporte da densidade da superfície da chama (FSD – *Flame Surface Density*), escrita da seguinte forma [Colin e Benkenida, 2004]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\left(D + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla \left(\frac{\Sigma}{\rho} \right) \right] = \\ \Sigma \left[C_{divu} \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} + C\alpha\Gamma \frac{\varepsilon}{k} + \frac{2}{3} \frac{\rho_u}{\rho_b} U_l \Sigma \frac{1-c}{c} - \beta U_l \Sigma \frac{1}{1-\tilde{c}} - \frac{2}{3} \frac{1}{(\gamma p)} \frac{\partial p}{\partial t} \right] + S_{conv} \end{aligned} \quad (3.95)$$

onde α e β são coeficientes empíricos de produção e destruição com valores de 1,6 e 1,0, respectivamente, C_{divu} é um parâmetro empírico com valor de 1,0, c é a variável de progressão média *ensemble* $c = 1 - (\rho Y_{Fu}^u) / (\rho_u Y_{TFu})$, S_{conv} é o termo fonte aplicado durante o período de ignição pela centelha e γ é o coeficiente isentrópico $\gamma = c_p/c_v$. O fator de correção C que aparece na Equação (3.95) é definido através da escala de tempo química e a interação da chama com as paredes

$$C = \frac{q_w}{\left\{ 1 + \left[\alpha \Gamma \frac{\varepsilon}{k} + \frac{2}{3} \frac{\rho_u}{\rho_b} U_l \Sigma \frac{(1-\tilde{c})}{\tilde{c}} \right] \tau_c \right\}} \quad (3.96)$$

para a escala de tempo química, definida como

$$\tau_c = \frac{\delta_l}{U_l Ze} \quad (3.97)$$

onde a espessura da chama laminar (δ_l) é representada pela Equação (3.71), Ze é o número de Zeldovich e q_w é o fator de extinção da chama na parede

$$q_w = \begin{cases} 1 & y^+ / y_c^+ > D_{querat} \\ 0 & y^+ / y_c^+ < D_{querat} \end{cases} \quad (3.98)$$

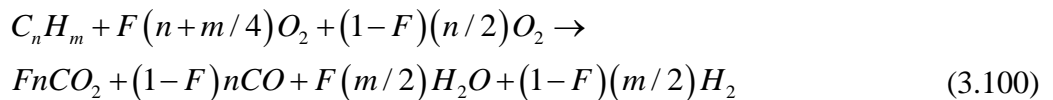
onde y_c^+ e D_{querat} são parâmetros com valores de 11,3 e 5,0 , respectivamente.

Por fim, a contribuição da convecção na vela de ignição satisfaz a seguinte expressão

$$\int_v S_{conv} dv = C_{conv} 2\pi R_k \frac{\rho}{\rho_u} U \quad (3.99)$$

onde U é a velocidade do fluido na vela de ignição, R_k é o raio do *kernel* da chama laminar e C_{conv} possui valor de 1,0.

Para o estágio pré-misturado da combustão, o mecanismo de reação de um passo para a oxidação do combustível segue a seguinte reação



onde

$$F = \begin{cases} 1 & \Phi < 1 \\ [4(n + m/4)/\Phi - 2n]/(2n + m) & 1 < \Phi < (2 + m/2n) \\ 0 & \Phi > (2 + m/2n) \end{cases} \quad (3.101)$$

A taxa de queima de combustível, $\dot{\omega}_{Fu}$, devido à propagação da chama na região do gás misturado e não queimado, segue a formulação,

$$\dot{\omega}_{Fu} = \rho_u Y_{TFu}^M U_l \Sigma \quad (3.102)$$

3.5.2.1.5 Modelo de Pós-Chama e Emissões

Qualquer espécie química ainda presente nos gases queimados pode submeter-se a novas reações, assim, no modelo ECFM-3Z, existem cinco conjuntos de reações: a pós-oxidação do combustível, a formação de radicais e dissociação, a cinética química de $CO \Leftrightarrow CO_2$, a formação de NO e a formação de fuligem. Como base, a composição inicial dos gases queimados é computada da seguinte forma [Colin e Benkenida, 2004].

$$Y_b^M = \frac{Y^M - (1-c)Y_u^M}{c} \quad (3.103)$$

A pós-oxidação do combustível é modelada pela seguinte reação de oxidação



e a taxa de queima de combustível nesta etapa é determinada pela aproximação de eddy break-up [Colin e Benkenida, 2004]

$$\dot{\omega}_{Fb} = C \frac{\varepsilon}{k} \min \left[Y_{Fb}^M, \frac{Y_{O_2}^M}{s_{O_2}} \right] \quad (3.105)$$

onde s_{O_2} o coeficiente estequiométrico de O_2 na reação da Equação (3.104).

O efeito de dissociação é considerado com a implementação de um conjunto de reações em equilíbrio



As três primeiras reações de moléculas biatômicas são dissociadas em suas respectivas moléculas monoatômicas, onde são utilizadas em outros mecanismos de pós-chama, tais como a cinética de oxidação de NO e CO₂.

A cinética química de CO \leftrightarrow CO₂ é resolvida pelo mecanismo reversível simples



A formação de NO é representada pelo clássico modelo Zeldovich térmico, onde NO é formado pela oxidação de nitrogênio atmosférico em elevadas temperaturas. Para este modelo, as principais reações são determinadas pelo mecanismo de 3 passos de Zeldovich



onde K_1 , K_2 e K_3 , são as constantes das taxas de reações no sentido da esquerda para direita e K_{-1} , K_{-2} , e K_{-3} são as constantes das taxas de reações no sentido inverso. As taxas são definidas como [Baulch *et al.*, 1973],

$$\begin{aligned} K_1 &= 1,8 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-32310}{T}\right) \\ K_{-1} &= 3,8 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-425}{T}\right) \\ K_2 &= 1,8 \times 10^7 T \exp\left(\frac{-4680}{T}\right) \\ K_{-2} &= 3,8 \times 10^6 T \exp\left(\frac{-20820}{T}\right) \\ K_3 &= 7,1 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-450}{T}\right) \\ K_{-3} &= 1,7 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-24560}{T}\right) \end{aligned} \quad (3.109)$$

A taxa de formação de NOx é significativa apenas com elevadas temperaturas, pois é necessária a quebra de ligação de N₂. Este efeito é representado por uma alta energia de ativação da reação, o que torna essa reação um passo limitante da taxa do mecanismo de Zeldovich. No entanto, a energia de ativação para oxidação do N é pequena, logo um estado quase estático pode ser estabelecido. A taxa de formação de NOx é definida por [Baulch *et al.*, 1973; Flower *et al.*, 1975; Monat, *et al.*, 1979],

$$R = \frac{\rho^2}{1 + K_{-1} \frac{Y_{NO}}{M_{NO}} \left(K_2 \frac{Y_{O_2}}{M_{O_2}} + K_3 \frac{Y_{OH}}{M_{OH}} \right)} \left[2K_1 \frac{Y_O}{M_O} \frac{Y_{N_2}}{M_{N_2}} - \frac{2K_{-1} \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}}{K_2 \frac{Y_{O_2}}{M_{O_2}} + K_3 \frac{Y_{OH}}{M_{OH}}} \left(K_{-2} \frac{Y_O}{M_O} \frac{Y_{NO}}{M_{NO}} + K_{-3} \frac{Y_H}{M_H} \frac{Y_{NO}}{M_{NO}} \right) \right] \quad (3.110)$$

onde as concentrações dos radicais O, OH e H são calculados pelo modelo de combustão.

3.6 Fração Mássica Queimada

Em motores de combustão interna de ignição por centelha a combustão inicia a partir de uma centelha elétrica, que dá partida ao processo de oxidação do combustível. A consequente liberação de calor provoca um aumento de temperatura e da pressão dos gases no interior da câmara de combustão. O comportamento no tempo da quantidade de calor liberada durante o ciclo possui aplicabilidade no estudo do processo termodinâmico, isto é, conhecendo a taxa de calor liberada pode-se prever o comportamento do motor. A taxa de calor liberada $dQ/d\theta$ é definida, com base na primeira lei da termodinâmica para os gases existentes no cilindro [Heywood, 1988], da seguinte forma

$$\frac{dQ}{d\theta} = \frac{\gamma}{\gamma-1} p \frac{dV}{d\theta} + \frac{1}{\gamma-1} V \frac{dp}{d\theta} \quad (3.111)$$

onde Q é o quantidade de calor liberado, γ é a relação de calores específicos, p a pressão termodinâmica dos gases, V o volume da câmara de combustão e θ o ângulo do eixo de manivelas. Observa-se que a taxa de liberação de calor é determinada a partir da evolução da

pressão interna e do volume do cilindro. Integrando a Equação (3.111) pode-se obter a curva normalizada da fração mássica queimada (FMQ, razão entre o combustível queimado até o momento e o combustível total utilizado no ciclo), sendo um resultado importante para quantificar a duração da combustão e o tempo de ignição, grandezas fundamentais para o estudo do processo de combustão em motores de ignição por centelha. O comportamento da curva da FMQ durante a evolução do ciclo parte de um valor mínimo e aumenta, a partir da centelha elétrica, para um valor máximo, à medida que o combustível é queimado ao longo do processo de combustão. Desta forma, a curva da FMQ tem limite inferior igual a 0 e superior igual a 1.

É conveniente utilizar os valores da curva da FMQ para caracterizar diferentes estágios do processo de combustão. A Figura 3.6 demonstra a curva característica do comportamento da FMQ para um motor de ignição por centelha, onde $\Delta\theta_d$ representa o intervalo do desenvolvimento da chama, isto é, o intervalo entre o instante de ignição e o surgimento de uma pequena parcela de massa queimada. Usualmente essa fração é de 10 %, e é influenciada pela mistura, composição e padrão de movimento do fluido nas proximidades da vela. O intervalo entre 1 % e 10 % da fração é conhecido como atraso da ignição (*ignition delay*), desde que a propagação da chama não inicie imediatamente após a centelha [Heywood, 1988]. O segundo estágio, representado por $\Delta\theta_b$ na Figura (3.6), é o intervalo de rápida queima, que compreende a fração de 10% a 90 % da massa de combustível, e também é influenciado pelas condições do escoamento na câmara de combustão. Já $\Delta\theta_b^*$ é a duração do processo de queima supondo um comportamento linear do processo.

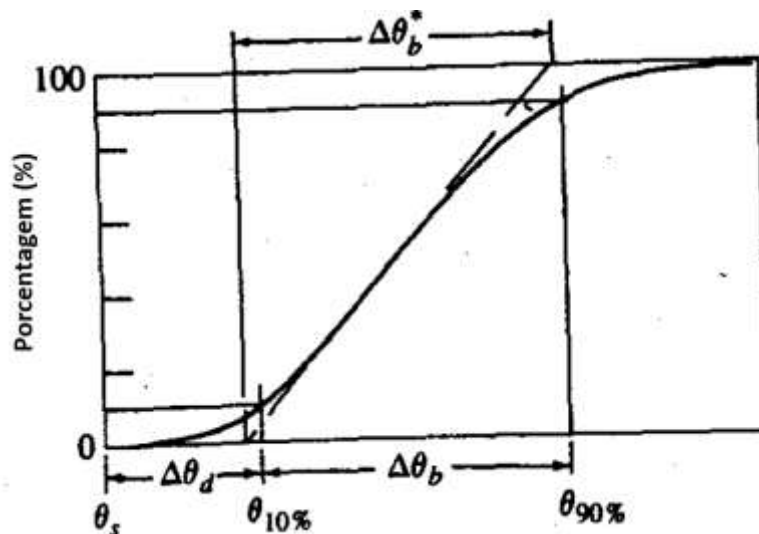


Figura 3.6 – Curva característica da FMQ em função do eixo de manivelas [adaptado de Heywood, 1988].

Alternativamente, Heywood, 1988, propõe correlacionar a FMQ para motores de combustão interna de ignição por centelha a partir de uma função de Wiebe, definida como

$$x_b = 1 - \exp\left(-a \left(\frac{\theta - \theta_0}{\Delta\theta_b}\right)^{m+1}\right) \quad (3.112)$$

onde x_b representa a função de Wiebe, θ_0 é o ângulo do início da combustão, a é um parâmetro que representa a eficiência da combustão, ou seja, quanto maior o seu valor indica que a queima é mais rápida na primeira metade da curva da Wiebe (muda a sua inclinação). Já m é denominado fator de forma da câmara e, para um valor fixo de a , quanto maior seu valor haverá maior liberação de calor na segunda metade da curva de Wiebe. Heywood, 1988, sugere valores de $a = 5$ e $m = 2$ como sendo uma boa aproximação para várias circunstâncias. Já Ferrari, 2005, considera que os valores de a possam variar entre 4,605 a 6,908.

4 METODOLOGIA NUMÉRICA

A Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) é a área da computação científica que estuda métodos computacionais para simulação de fenômenos que envolvem fluidos em movimento, com ou sem transferência de calor e massa. Visando uma redução no número de experimentos, ela tem o objetivo de explorar fenômenos que não poderiam ser estudados em laboratório de forma prática, por razões básicas como:

- (a) O fenômeno em estudo nem sempre é de possível reprodução, mesmo em escala reduzida;
- (b) O custo e o tempo da montagem podem ser proibitivos.

A aplicabilidade da Dinâmica dos Fluidos Computacional depende da situação tratada, sendo necessário o total conhecimento, tanto dos aspectos físicos do problema quanto dos aspectos numéricos da metodologia de solução.

As equações de Navier-Stokes são equações diferenciais parciais não lineares, e a teoria matemática dessa classe de equações ainda não está suficientemente desenvolvida para permitir a obtenção de soluções analíticas da maioria dos casos de interesse na engenharia.

No presente trabalho se aplica o método numérico dos Volumes Finitos para resolver as equações diferenciais parciais. Este método integra as equações diferenciais em volumes de controle, obtendo sistemas de equações algébricas equivalentes a serem resolvidos.

O desenvolvimento de uma metodologia de CFD para simulações em motores é uma tarefa desafiadora, pois motores alternativos exibem muitas características e fenômenos complexos. A forma da câmara de combustão, pistão e coletores de admissão e exaustão, juntamente com o movimento das válvulas e do pistão, são características que tornam mais difícil a tarefa.

No presente trabalho é utilizado o programa comercial Star-cd, da CD-adapco. A metodologia numérica utilizada é descrita nas seções subsequentes, onde buscou-se, essencialmente, focar apenas a formulação proposta pelo programa e utilizada neste estudo. Outras formulações não serão apresentadas.

4.1 Etapas da Solução Numérica

As etapas a serem cumpridas são as seguintes [Hirsch, 2007; Ferziger e Perić, 2002]:

Definição do modelo matemático: definir o processo físico que se deseja simular, e assim selecionar o modelo matemático que melhor o descreve.

Método de discretização e sistema de coordenadas: metodologia de construção da malha de volumes finitos, que discretiza o domínio de cálculo, podendo implicar em uma malha estruturada ou não-estruturada, móvel ou fixa.

Esquema numérico: é o conjunto de relações algébricas entre os pontos da malha. Ele deve satisfazer certas regras e condições, visando minimizar o erro numérico inerente a cada esquema.

Fase de solução: solução dos sistemas algébricos resultantes da integração das equações diferenciais que descrevem o fenômeno, no espaço e no tempo, incluindo técnicas de estabilidade e aceleração da convergência.

Pós-processamento: o pós-processamento dos dados numéricos resultantes da solução, assim como a interpretação dos seus significados físicos.

4.2 Propriedades do Método Numérico

O conjunto de equações definido por um esquema numérico necessita de uma análise em suas propriedades, isso é, investigar a validade da discretização e sua precisão, na tentativa de quantificar os erros numéricos associados. São então definidos conceitos, tais como; consistência, estabilidade e convergência. Tais conceitos são descritos abaixo.

4.2.1 Consistência

A consistência é uma condição relativa ao esquema numérico, que deve tender à equação diferencial quando os tamanhos da malha espacial (Δx) e temporal (Δt) tendam a zero [Hirsch, 2007].

Alguns métodos de discretização conduzem a erros de truncamento que são funções da razão de Δx para Δt , ou vice-versa. Neste caso, a exigência de consistência é apenas condicionalmente cumprida: Δx e Δt devem ser reduzidos de modo que permitam uma razão adequada para tender a zero.

Caso o erro de truncamento vá para zero, a discretização é consistente com a equação diferencial parcial (EDP). Para melhor compreensão, considere-se a equação diferencial da difusão, em regime transiente

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Gamma_{\phi} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (4.1)$$

onde ϕ é uma variável escalar dependente e Γ_{ϕ} é a difusão da grandeza considerada. Resolvendo numericamente por aproximações de diferenças finitas

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + \Gamma_{\phi} (\Delta t) \frac{\phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i+1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (4.2)$$

onde n denota o esquema temporal. Para verificar que a discretização da Equação (4.2) é consistente com a Equação (4.1), deve-se escrevê-la a partir da expansão da série de Taylor, os termos ϕ_{i+1}^n , ϕ_{i-1}^n e ϕ_i^{n+1} em torno do ponto (x_i, t_n) :

$$\begin{aligned} \phi_{i\pm 1}^n &= \phi_i^n \pm (\Delta x) \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i^n + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_i^n \pm \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left. \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right|_i^n + O(\Delta x)^4 \\ \phi_i^{n+1} &= \phi_i^n + (\Delta t) \left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_i^n + \frac{(\Delta t)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \right|_i^n + O(\Delta t)^3 \end{aligned} \quad (4.3)$$

Substituindo a Equação (4.3) em (4.2), obtêm-se

$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_i^n}_{EDP} = \Gamma_{\phi} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_i^n - \underbrace{\left[\frac{\Delta t}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \right] \Big|_i^n}_{\text{Erro de truncamento}} + O[(\Delta t)^2, (\Delta x)^2] \quad (4.4)$$

Quando $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$, o erro de truncamento na Equação (4.4) tende a zero, fornecendo a equação diferencial definida na partida. Isso indica que a discretização da Equação (4.2) é consistente com a EDP representada na Equação (4.1).

No que tange à metodologia utilizada no presente trabalho, todo método numérico desenvolvido a partir das equações na forma conservativa, usando volumes finitos, é consistente [Ferziger e Perić, 2002].

4.2.2 Estabilidade

Um método numérico estável é aquele no qual quaisquer erros ou perturbações na solução não são amplificados sem limite. Essa amplificação é puramente relativa ao método numérico, e não à física do problema, portanto deve ser evitado.

Diversos fatores interferem na estabilidade, tais como erro de arredondamento da máquina, que vão se multiplicando e podem desestabilizar a solução; dificuldade de acoplamentos entre as variáveis, fazendo com que algumas variáveis evoluam mais rapidamente que outras, provocando a instabilidade [Maliska, 2004].

Em relação à estabilidade, os métodos numéricos podem ser classificados em [Fortuna, 2000]:

- (a) *Condicionalmente estáveis*: para fornecerem soluções numéricas estáveis, devem satisfazer uma condição de estabilidade. Métodos explícitos, em geral, são desse tipo;
- (b) *Incondicionalmente estáveis*: não necessitam satisfazer quaisquer critérios de estabilidade para produzirem soluções estáveis. Em geral, métodos implícitos e alguns explícitos muito particulares pertencem a essa categoria;
- (c) *Incondicionalmente instáveis*: não existem valores de Δt que permitam a eles fornecerem soluções estáveis.

Métodos implícitos apresentam usualmente maior estabilidade que métodos explícitos. Por isso, apesar de as formulações explícitas fornecerem equações lineares simples de serem calculadas, ao contrário daquelas fornecidas pelas discretizações implícitas, a possibilidade de utilizar valores de Δt maiores nos métodos implícitos os torna atrativos. Quando a EDP é linear, a aproximação mais usada para o estudo da estabilidade é a técnica conhecida como análise de estabilidade de *Von Neumann* [Maliska, 2004].

4.2.3 Convergência

Uma solução numérica é dita convergente quando é estável e consistente. Em particular, o esquema numérico é consistente e, junto com a estabilidade, são condições necessárias e suficientes para que se tenha convergência.

Ao satisfazer $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ e não retornar à equação diferencial original, também a solução numérica não se aproximará da solução exata da equação diferencial original, mas

sim de outras. No entanto, um esquema consistente é inútil se a solução numérica não for convergente [Fortuna, 2000].

4.3 Discretização das Equações pelo Método de Volumes Finitos

Historicamente, o método dos volumes finitos foi introduzido no campo da dinâmica dos fluidos computacional em 1971, na forma bidimensional, e em 1973, na forma tridimensional [Hirsch, 2007].

Embora muitas vezes o método de volumes finitos seja confundido com o método de diferenças finitas, os dois possuem formulações diferentes. O esquema de diferenças finitas tem uma dedução puramente matemática, substituindo-se os operadores diferenciais por outros algébricos, obtidos a partir da série de Taylor. O método de volumes finitos tem base física e o esquema numérico é aplicado na integração das equações de conservação. O método de volumes finitos utiliza pequenos volumes de controle, enquanto o de diferenças finitas utiliza um domínio discretizado em pontos.

4.3.1 Método dos Volumes Finitos (MVF)

O MVF é particularmente útil quando a malha não é uniforme, especialmente em situações bi e tridimensionais, sendo, portanto, adequado para geometrias complexas. Conservativa por construção, sua formulação satisfaz a conservação das entidades físicas envolvidas.

Considere a equação da conservação para uma quantidade genérica escalar ϕ , onde se assume que o campo de velocidade e todas as propriedades do escoamento são conhecidas

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S_\phi \quad (4.5)$$

onde S_ϕ é o termo fonte por unidade de volume. Para resolver-se numericamente, a equação diferencial deve ser integrada sobre um volume de controle fixo no espaço, conforme a Figura 4.1. P é o nó central do volume de controle, enquanto N , S , E e W são os nós adjacentes. Já n , s , e e w são as faces do volume e Δx e Δy são as distâncias de um ponto ao outro nas coordenadas x e y , respectivamente.

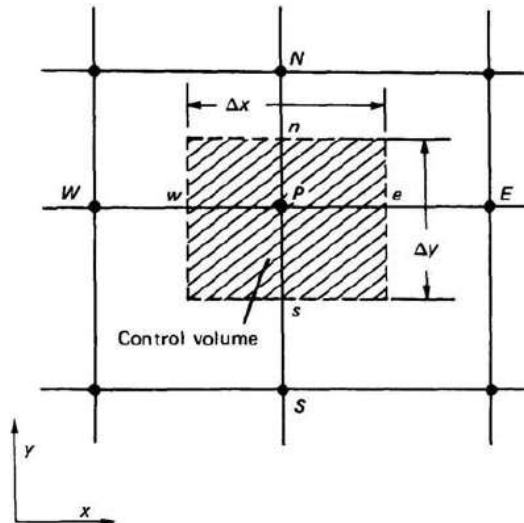


Figura 4.1 - Volume de controle para uma situação bidimensional [Patankar, 1980]

A espessura, na coordenada z , é assumida como unitária. Portanto, na integração da Equação (4.5) neste volume de controle

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV + \int_S \rho u_j \phi dS = \int_S \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} dS + \int_V S_\phi dV \quad (4.6)$$

os índices V e S denotam integrais de volume e superfície, respectivamente. A Equação (4.6) representa o balanço da propriedade ϕ no volume de controle.

4.3.2 Esquemas de Discretização no Espaço – Funções de Interpolação

A maneira como os fluxos convectivos e difusivos são formulados é um dos principais fatores que determinam a precisão e a estabilidade. Existem duas principais classes de aproximações de fluxos convectivos, de uso generalizado, que são:

- (a) Esquemas de primeira-ordem, onde a equação discretizada é resolvida com maior facilidade, produzindo soluções coerentes com a física, mas que em alguns casos pode levar à difusão numérica. Neste esquema, o erro de truncamento diminui à medida que a malha for refinada, porém aumenta o tempo computacional [Leschziner, 1980].
- (b) Esquemas de alta-ordem, que comportam-se melhor na presença de fortes gradientes, mas as equações são resolvidas com mais dificuldade. Em casos extremos podem

causar instabilidade e até mesmo dispersão numérica. Estas situações podem ser amenizadas com o refinamento da malha, subrelaxação da solução, ou pelo uso de esquemas que combinam discretizações de primeira com segunda-ordem (*blended differencing*) [Hirsch, 2007].

4.3.2.1 Esquema de Diferença Central - CD

Os termos fonte (s_ϕ) e difusivo ($\Gamma_\phi \partial\phi/\partial x_i$), não apresentam problema com esta aproximação. A atenção recai sobre o termo advectivo ($\rho u \phi$). Adotando um problema unidimensional de advecção/difusão da propriedade ϕ , sem o termo transiente e de fonte

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad (4.7)$$

e integrando a equação no volume elementar com nó P , obtém-se

$$\begin{aligned} \int_w^e \frac{d}{dx}(\rho u \phi) dx &= \int_w^e \frac{d}{dx} \left(\Gamma_\phi \frac{d\phi}{dx} \right) dx \\ (\rho u)_e \phi_e - (\rho u)_w \phi_w &= \left(\Gamma_\phi \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma_\phi \frac{d\phi}{dx} \right)_w \end{aligned} \quad (4.8)$$

Os subíndices e e w representam as fronteiras do volume de controle onde devem ser avaliados os fluxos advectivos e difusivos. Portanto, a Equação (4.8) assume a seguinte forma

$$(\rho u)_e \frac{\phi_E + \phi_P}{2} - (\rho u)_w \frac{\phi_P + \phi_W}{2} = \Gamma_E \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} - \Gamma_W \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \quad (4.9)$$

após rearranjada, na forma

$$A_P \phi_P = A_E \phi_E + A_W \phi_W \quad (4.10)$$

os coeficientes são dados por

$$\begin{aligned}
A_E &= -\frac{(\rho u)_e}{2} + \frac{\Gamma_E}{\Delta x} \\
A_W &= \frac{(\rho u)_w}{2} + \frac{\Gamma_W}{\Delta x} \\
A_P &= A_E + A_W + ((\rho u)_e - (\rho u)_w)
\end{aligned}
\tag{4.11}$$

Considerando a velocidade u positiva, a seguinte relação deve ser satisfeita, para que o coeficiente A_E seja positivo, a fim de não violar a física do problema

$$\frac{\rho u \Delta x}{\Gamma_\phi} \leq 2
\tag{4.12}$$

onde a expressão à esquerda da inequação é reconhecida como o número de Reynolds do volume de controle. Observa-se que, quando a velocidade u aumenta, a malha deve ser reduzida proporcionalmente. Desta forma, o uso de diferenças centrais na aproximação dos termos advectivos cria, quase sempre, coeficientes negativos, pois é impossível, em problemas reais, refinar a malha até forçar sua positividade [Maliska, 2004].

4.3.2.2 Esquema de Diferenças Upwind - UD

O esquema CD ao ser aplicado nos termos advectivos não leva em conta a física do problema. Patankar (1980) propôs que os termos difusivos permaneçam inalterados, mas os termos advectivos sejam calculados da seguinte forma

$$\begin{aligned}
\phi_e &= \begin{cases} \phi_P & \text{se } u_e > 0 \\ \phi_E & \text{se } u_e < 0 \end{cases} \\
\phi_w &= \begin{cases} \phi_W & \text{se } u_w > 0 \\ \phi_P & \text{se } u_w < 0 \end{cases}
\end{aligned}
\tag{4.13}$$

Os coeficientes da Equação (4.10) tornam-se então

$$\begin{aligned}
 A_E &= \frac{\Gamma_E}{\Delta x} + \max[-(\rho u)_e, 0] \\
 A_W &= \frac{\Gamma_W}{\Delta x} + \max[(\rho u)_w, 0] \\
 A_P &= A_E + A_W + (\rho u)_e - (\rho u)_w
 \end{aligned}
 \tag{4.14}$$

As conseqüências são mostradas na Figura 4.2, que representa o comportamento de ϕ entre dois nós. A curva B corresponde a um problema puramente difusivo, onde $d/dx(-\Gamma d\phi/dx) = 0$, ou seja, o número de Peclet; $Pe = \rho u \Delta x / \Gamma_\phi$. Neste caso particular vale a média aritmética para a aproximação de ϕ_e . Mas quando a velocidade $u > 0$, obtêm-se as curvas C e A, representando $Pe > 0$. No limite, a curva A corresponde a um problema de advecção pura. Do mesmo modo, quando a velocidade $u < 0$, tem-se o inverso, curvas E e D.

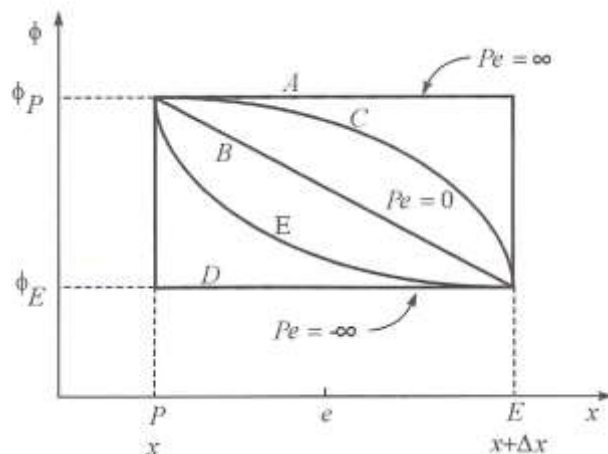


Figura 4.2 - Variação com o número de Peclet [Maliska, 2004]

O esquema UD é estável para qualquer valor do número de Peclet. Por outro lado, por ser de primeira ordem, apresentam resultados menos exatos do que um esquema estável de segunda ordem. A aproximação assumida para o termo advectivo é precisa apenas quando o módulo de Pe é muito grande, isso é, quando se tem predominantemente advecção.

4.3.2.3 Esquema de Diferenças Upwind Linear - LUD

O esquema *Upwind Linear* (LUD – *Linear Upwind Differencing*) é adaptado de uma formulação de segunda ordem para malhas não-estruturadas e derivadas de um esquema originalmente proposto para malhas estruturadas. Resulta em menos difusão numérica do que

o esquema UD, mas pode produzir soluções que estão fora dos limites físicos de ϕ (dispersão numérica). Mais informações sobre o método podem ser encontradas em Wilkes e Thompson, 1983.

4.3.2.4 Esquema *Blended Differencing* - BD

Este esquema combina esquemas de alta ordem, como CD e LUD com o esquema de baixa ordem UD. Portanto, o fator de combinação (*blending factor*), γ , é especificado pelo usuário. Sua composição é a seguinte [Star-cd, 2014a]

$$\phi_E^{BD} = \gamma \phi_E^{CD/LUD} + (1 - \gamma) \phi_E^{UD} \quad (4.15)$$

O programa permite escolher individualmente, para cada equação de transporte, a opção de usar este método ou não.

No presente trabalho foi utilizada esta aproximação.

4.3.3 Esquema de Discretização Temporal

No Star-cd apenas esquemas implícitos para o avanço no tempo estão disponíveis.

No presente trabalho é utilizada aproximação de primeira ordem denominada esquema de Euler totalmente implícito. Esta aproximação usa a suposição da variação linear da variável entre dois níveis de tempo. A única integração em relação ao tempo na equação da conservação, Equação (4.6), ocorre no termo não estacionário. Portanto, utilizando a Figura 4.3, a aproximação temporal assume a seguinte forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV \approx \frac{(\rho \phi \Delta V)^n - (\rho \phi \Delta V)^{n-1}}{\Delta t} \quad (4.16)$$

A formulação totalmente implícita permite passos de tempo usualmente maiores do que as formulações explícitas. Para um problema transiente, o Δt deve ser pequeno o suficiente para limitar erros de aproximações temporais a níveis aceitáveis [Richtmeyer e Morton, 1967].

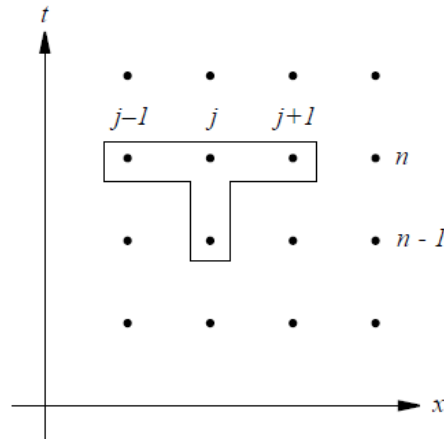


Figura 4.3 - Esquema de discretização temporal – Euler totalmente implícito [Star-cd, 2014a]

A escolha de um método de primeira ordem foi devido à aproximação de segunda ordem ser rigorosamente preservada apenas para situações onde a densidade apresenta-se constante e onde não haja movimento de malha. Também é a aproximação recomendada para escoamentos compressíveis [Star-cd, 2014a].

4.4 Equações Finais do Método de Volumes Finitos

A forma final compacta da equação do transporte de um escalar genérico, discretizada pelo método de volumes finitos, é obtida substituindo os termos das aproximações na Equação (4.6) [Star-cd, 2014a] é

$$A_P \phi_P^n = \sum_m A_m \phi_m^n + B_P^0 \phi_P^0 + S_\phi \quad (4.17)$$

onde A é o coeficiente que relacionado os efeitos advectivos e difusivos, por exemplo Equação (4.11); o sub-índice m representa os volumes adjacentes e/ou subjacentes ao ponto P , o superíndice 0 representa o valor do escalar genérico inicial da coordenada temporal, e

$$B_P^0 = \frac{(\rho \Delta V)^0}{\Delta t} \quad (4.18)$$

A equação da continuidade na forma compacta [Star-cd, 2014a] é

$$B_p^n - B_p^0 = \sum (\rho \phi_p \cdot S) \quad (4.19)$$

sendo que S corresponde à normal da face da célula. Para cada célula computacional se aplica a Equação (4.29) formando um conjunto de equações e, quando necessário, modifica-as para incorporar as condições de contorno. A estratégia para resolver o conjunto de equações envolve solução iterativa, observando-se que a escolha do esquema de interpolação pode ter influência sobre a confiabilidade e tempo computacional.

4.5 Acoplamento Pressão-Velocidade

Na literatura existem vários algoritmos para determinar a pressão. Na formulação do Star-cd dois algoritmos implícitos estão disponíveis, são eles: o método SIMPLE (*Semi-Implicit for Pressure-Linked Equations*) [Patankar, 1980] e o método PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*) [Issa, 1986; Issa *et al.*, 1986], especialmente adaptado para os requisitos do programa. Entre as características que os dois métodos têm em comum, o algoritmo SIMPLE pode ser considerado, em muitos aspectos, como um subconjunto do PISO, porém consiste em fazer apenas uma correção para a pressão, obedecendo à equação da continuidade, seguida de uma correção da velocidade. Nos métodos para o tratamento do acoplamento pressão-velocidade, a sequência de cálculo envolve dois passos distintos: no primeiro, as velocidades são corrigidas de maneira a satisfazer a equação da conservação da massa; no segundo, as pressões são avançadas para completar o ciclo iterativo. No método SIMPLE, as equações para a correção das velocidades são obtidas a partir das equações do movimento. Uma das vantagens deste método é o fato de não ser necessária a solução de um sistema linear para determinar a pressão, mas, por outro lado, a taxa de convergência pode ser baixa [Maliska, 2004; Patankar, 1980]. Embora no Star-cd estejam disponíveis os dois métodos, é recomendado utilizar o método PISO quando envolva o processo de combustão [Star-cd, 2014].

4.5.1 Algoritmo PISO

As principais características do método PISO são [Issa, 1986; Issa *et al.*, 1986]:

- A estratégia de correção utiliza a separação de operadores (*operator-split*), possibilitando o desacoplamento temporário das equações do escoamento, umas com as outras, podendo ser resolvidas sequencialmente;
- A equação da continuidade é aplicada com o auxílio de uma equação para a pressão, obtida pela combinação das formulações de volume finitos para a conservação de massa e quantidade de movimento;
- A sequência da solução envolve uma fase de estimativa, que gera um campo de velocidades provisório derivado das equações de quantidade de movimento e uma distribuição de pressão provisória. Logo, os campos provisórios são então refinados em estágios de correções, exigindo satisfazer um critério de convergência para os balanços da continuidade e quantidade de movimento;
- Subsequentemente, os conjuntos de equação separadas envolvem, em qualquer estágio, apenas uma variável de campo, por exemplo, um conjunto de vetores de incógnitas é substituído por uma sequência de conjuntos de escalares;
- Por fim, os conjuntos formados são resolvidos por um processo iterativo.

Desta forma, com o objetivo de detalhar a implementação do algoritmo, considera-se um conjunto de volumes alinhados e fixos em um plano cartesiano, como mostrado na Figura 4.4.

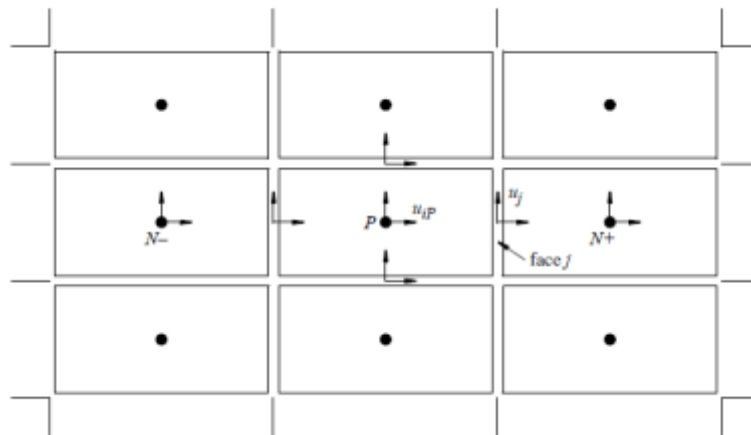


Figura 4.4 – Implementação do algoritmo PISO [Star-cd, 2014a].

As equações de quantidade de movimento utilizadas pelo método dos volumes finitos são extraídas das equações de transporte de um escalar genérico, aplicadas para um campo de velocidade

$$A_P u_{i,P}^n = \sum_m A_m u_{i,m}^n + B_p^0 u_{i,P}^0 + S + D_P (p_{N+}^n - p_{N-}^n) \quad (4.20)$$

onde D_P é um coeficiente geométrico, e o subíndice N indica os volumes adjacentes ao ponto P . A equação da continuidade é escrita como

$$B_p^n - B_p^0 + \sum_i (\rho^n u_j^n \cdot S_j) = 0 \quad (4.21)$$

Para montar a equação de quantidade de movimento ente célula e face, a velocidade na face u_j , precisa ser expressa em termos de velocidade nodais e pressões vizinhas, da seguinte forma

$$\bar{A}_p u_j^n = \sum_m \bar{A}_m \bar{u}_{i,m}^n + \bar{B}_p^0 u_{i,P}^0 + \bar{S} + \bar{D}_P (p_P^n - p_{N+}^n) \quad (4.22)$$

onde a barra sobre os coeficientes nodais representa o valor médio determinado pela sequência de correções. Esta equação quando substituída na equação da continuidade proporciona uma relação para a pressão

$$A_P p_P^n = \sum_m A_m p_m^n + S \quad (4.23)$$

Assim, um conjunto de equações é formado, a partir do qual a pressão pode ser calculada através de uma sequência de passos.

4.5.1.1 Sequência de Passos da Solução

Partindo de valores iniciais dos campos, o algoritmo PISO avança no tempo na seguinte sequência de passos [Issa, 1986; Issa *et al.*, 1986]:

- (1) *Estágio predictor* – a Equação (4.20) é montada para cada variável, e o sistema resolvido iterativamente seguindo a forma de separação de operadores para o campo de velocidade nodal:

$$A_p u_{i,p}^{(1)} = \sum_m A_m u_{i,m}^{(1)} + B_p^0 u_{i,p}^0 + S + D_p (p_{N+}^{(0)} - p_{N-}^{(0)}) \quad (4.24)$$

onde $p^{(0)}$ corresponde ao campo de pressão inicial do passo de tempo. A solução da equação é determinada pelo processo iterativo; as velocidades provisórias nas faces, $u_j^{(1)}$, são determinadas pela Equação (4.22), sendo que u_i^n e p^n são substituídos por $u_i^{(1)}$ e p^0 , respectivamente.

(2) *Primeiro estágio de correção* – o primeiro estágio de correção é determinado pela seguinte equação de quantidade de movimento nodal

$$A_p u_{i,p}^{(2)} = \sum_m A_m u_{i,m}^{(1)} + B_p^0 u_{i,p}^0 + S + D_p (p_{N+}^{(1)} - p_{N-}^{(1)}) \quad (4.25)$$

e as equações de quantidade de movimento nas faces são aproximadas pela substituição de u_i^n e p na Equação (4.22) por $u_j^{(1)}$ e $p^{(1)}$, respectivamente. De modo correspondente, a equação da pressão é aproximada como

$$A_p p_p^{(1)} = \sum_m A_m p_m^{(1)} + S \quad (4.26)$$

Assim, o campo de pressão $p^{(1)}$ é resolvido e as velocidades $u_i^{(2)}$ e $u_j^{(2)}$ são obtidas pela Equação (4.25)

(3) *Estágio de correção adicional* – os outros estágios das correções são calculados da mesma forma que a primeira correção, no entanto, utilizando equações generalizadas

$$A_p u_{i,p}^{(q)} = \sum_m A_m u_{i,m}^{(q)} + B_p^0 u_{i,p}^0 + S + D_p (p_{N+}^{(q)} - p_{N-}^{(q)}) \quad (4.27)$$

$$A_p p_p^{(q)} = \sum_m A_m p_m^{(q)} + S \quad (4.28)$$

onde $q = 1, 2, \dots$ é o nível de correção. Os coeficientes AP são mantidos constantes. As soluções de estágios sucessivos representam melhor aproximação da solução da equação original. Por exemplo, $u^{(q+1)}$ e $p^{(q+1)}$ tendem aos valores de u^n e p^n com o aumento de q .

Após completar o número necessário de correções, a solução calculada é utilizada como condição inicial para o passo de tempo subsequente, onde o processo é repetido a partir do estágio 1.

4.6 Condições de Contorno

O Star-cd suporta a maioria das condições de contorno das situações práticas. As condições de contorno são aplicadas às faces das células e várias combinações delas são possíveis. As principais condições de contorno são descritas abaixo [Star-cd, 2014a].

(a) Entrada (*inlet*): existem dois tipos de condições de contorno de entrada: uma aplicada quando o perfil de velocidades é conhecido, e outra quando a condição de estagnação e a direção do escoamento são dadas. Na condição de fluxo de massa local ou velocidade prescrita, o valor da condição é fixo e atribuído pelo usuário. Para a condição de estagnação prescrita, este tratamento assume que os dados de entrada são atribuídos na fronteira, definido pelas seguintes expressões:

a. Temperatura de estagnação T_{st}

$$h(T_{st}) = h(T_{\infty}) + \left(\frac{V_{\infty}^2}{2} + k_{\infty} \right) \quad (4.29)$$

b. Pressão de Estagnação p_{st} para escoamento compressível

$$p_{st} = p_{\infty} \left(\frac{T_{st}}{T_{\infty}} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad (4.30)$$

onde V é a magnitude da velocidade, γ é a relação de calor específico e o subscrito ∞ denota condições à frente (*upstream*) conhecidas. A opção de estagnação é tipicamente utilizada quando as propriedades do fluido não são influenciadas em modo

significativo pelas condições de entrada no domínio. Usado principalmente nas situações compressíveis.

- (b) Saída (*outlet*): as condições de saída são estimadas em dois estágios: (I) a distribuição das variáveis no plano de saída são avaliadas por uma extrapolação a partir do escoamento à frente, supondo que os gradientes de todas as variáveis ao longo da direção do escoamento na superfície de saída são considerados como zero (condição de escoamento localmente parabólico) e (II) as velocidades são ajustadas a fim de satisfazer o escoamento em massa requerido.
- (c) Pressão: a condição de pressão pode ser na forma estática, piezométrica ou ambiente. Seu valor é conhecido e a direção e magnitude do escoamento devem ser determinadas.
- (d) Parede: permite definir se ela possui deslizamento do fluido ou não. Também permite definir se a parede é permeável ou impermeável a fluxo de massa.
- (e) Temperatura: permite prescrever a temperatura na parede e o valor da resistência térmica.

5 MODELAGEM NUMÉRICA E EXPERIMENTAL

A simulação em motores exige técnicas avançadas para criação da malha, já que fortes gradientes de velocidade, pressão, temperatura e concentração estão presentes e não necessariamente localizados em uma mesma região. Desta forma, necessita-se de refinamento localizado em certas regiões da malha, para uma boa descrição do fenômeno. A geração de malha exige mais esforço à medida que cresce a complexidade geométrica e física, incluindo domínios móveis, como ocorre em simulações de motores de combustão interna [Jasak *et al.*, 1999].

Atualmente técnicas automáticas de geração de malha em ICE estão disponíveis, como as presentes no *es-ice* do Star-cd, utilizado no presente trabalho. Portanto, neste capítulo apresentam-se as metodologias empregadas para geração da malha computacional e etapas experimentais.

5.1 Procedimento Numérico - Metodologia do *es-ice*

Devido aos altos gradientes gerados durante o movimento mútuo das válvulas e pistão, os métodos numéricos aplicados a motores exigem uma adequada discretização do domínio de cálculo em certas regiões. Desta forma, os volumes discretos devem conter pequenas dimensões em curvaturas, podendo assim capturar características da geometria do modelo e atender a requisitos mínimos para os modelos matemáticos. O Star-cd *es-ice* apresenta funcionalidades que geram maior integridade das características geométricas nas regiões de maior dificuldade de geração de malha, por exemplo: sede da válvula e a vela de ignição. Assim, pode-se dividir, brevemente, sua metodologia de criação de malha em três etapas

- (a) Importação da geometria e reconhecimento da superfície pelo método de triangulação;
- (b) Geração da malha computacional;
- (c) Pós-processamento.

Muitas vezes a geometria importada de programas CAD (*Computer Aid Design*) apresenta faces com grandes dimensões, comprometendo a representação das características geométricas do modelo, conforme mostrado na Figura 5.1. A reestruturação destas faces em

dimensões menores sobre a superfície é a primeira etapa exigida para preservar o domínio em estudo mais próximo das características reais.

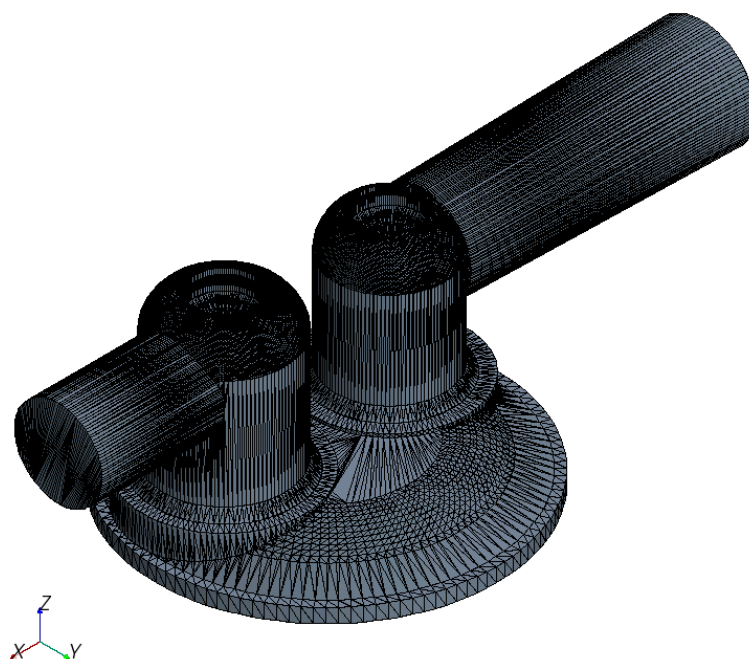


Figura 5.1 – Geometria do HONDA GX35 importada do programa CAD.

A segunda etapa da metodologia é a geração do domínio computacional, ou seja, a discretização da geometria em volumes. O Star-cd *es-ice* disponibiliza a geração de volumes do tipo hexaédrico estruturado (método *mapping*) e não-estruturado (método *trimming*). O primeiro método de geração se aplica a geometrias simples, ou em casos que apenas se analisa o cilindro, mesmo assim exigindo um grande tempo para criação do modelo. Já a geração de malhas não-hexaédricas possui um campo de aplicação mais amplo em função dos recursos voltados para geometrias complexas. Neste trabalho, utilizou-se o método *trimming* para a construção de todos os modelos que serão apresentados.

Possíveis erros no decorrer da resolução do domínio podem ser minimizados considerando algumas recomendações na geração da malha antes de resolvê-la [Star-cd, 2014]. Em situações que envolvam o processo de combustão é importante resolver as pequenas escalas do fenômeno físico, no tempo e no espaço, para a acuracidade da solução. As escalas com maior importância no cálculo da combustão pré-misturada são dominadas pela evolução da chama [Star-cd, 2014a]. Portanto, a malha nesta situação deve possuir no mínimo 10 volumes próximos à zona de reação turbulenta (na direção média da propagação da chama), onde na fase totalmente desenvolvida abrange várias escalas de comprimento. O

tamanho da célula nesta região é normalmente de 1 mm [Star-cd, 2014]. A Figura 5.2 apresenta a distribuição das células computacionais na região da ignição.

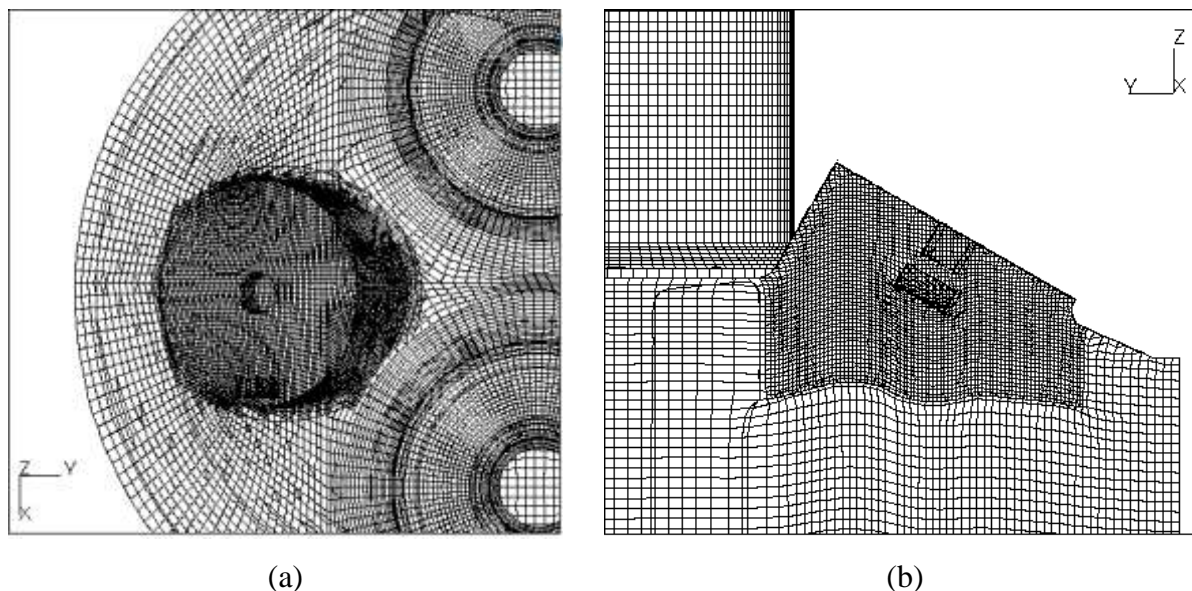


Figura 5.2 – Distribuição das células na região da ignição
(a) vista superior e (b) vista lateral em corte

Na distribuição radial, recomenda-se no plano horizontal da válvula conter no mínimo 72 volumes ao redor da válvula de exaustão e 80 volumes na válvula de admissão, como mostra a Figura 5.3. Na entrada e saída dos coletores de admissão e exaustão foram adicionadas 20 e 10 camadas paralelas, respectivamente, com a finalidade de garantir a perpendicularidade do vetor velocidade em relação às faces de entrada e saída. A geração da malha dos coletores utiliza esta distribuição de faces como principal parâmetro, ou seja, esta malha em duas dimensões (conhecido como grade) é extrudada na direção axial da haste da válvula, assim gerando a malha volumétrica dos coletores.

Em relação ao cilindro, o mesmo deve possuir no mínimo 70 camadas de volumes horizontais no PMI e 5 camadas no PMS, conforme mostrado na Figura 5.4. No entanto, este parâmetro é influenciado pela geração da grade citada anteriormente, já que a extrusão das células axiais é definida pela quantidade de volumes ao redor das válvulas. Atendendo os dois requisitos mínimo de célula ao redor das válvulas e camadas no cilindro, os coletores devem possuir no mínimo 100.000 volumes para cada um, e o cilindro 350.000 volumes para o extremo inferior. Demais informações sobre a metodologia *es-ice* são apresentadas em Zancanaro, 2010.

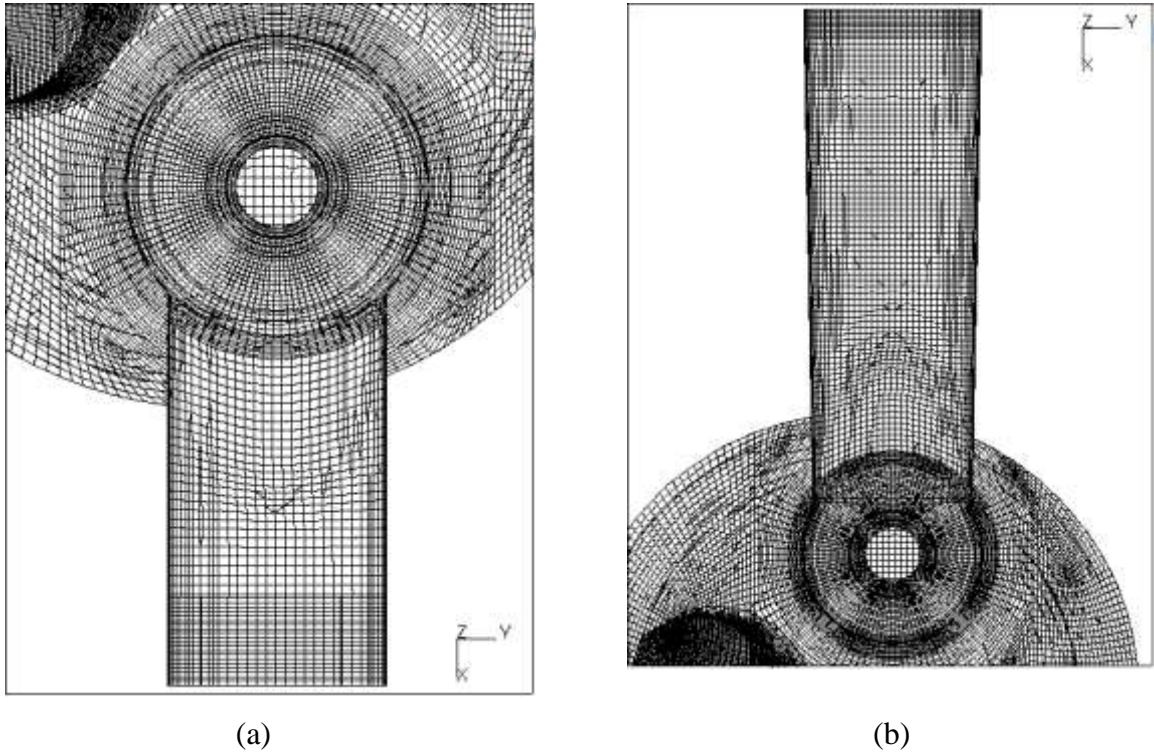


Figura 5.3 – Distribuição das células radiais ao redor das válvulas
(a) Admissão e (b) Exaustão.

A fim de atender aos requisitos impostos, o modelo de combustão exigiu 128.438 e 179.368 volumes para os coletores de admissão e exaustão, respectivamente. No cilindro, em função das restrições de dimensões dos volumes, seu total foi de 1.059.888 volumes. Após atender a todos os requisitos recomendados, a Figura 5.5 apresenta o domínio final.

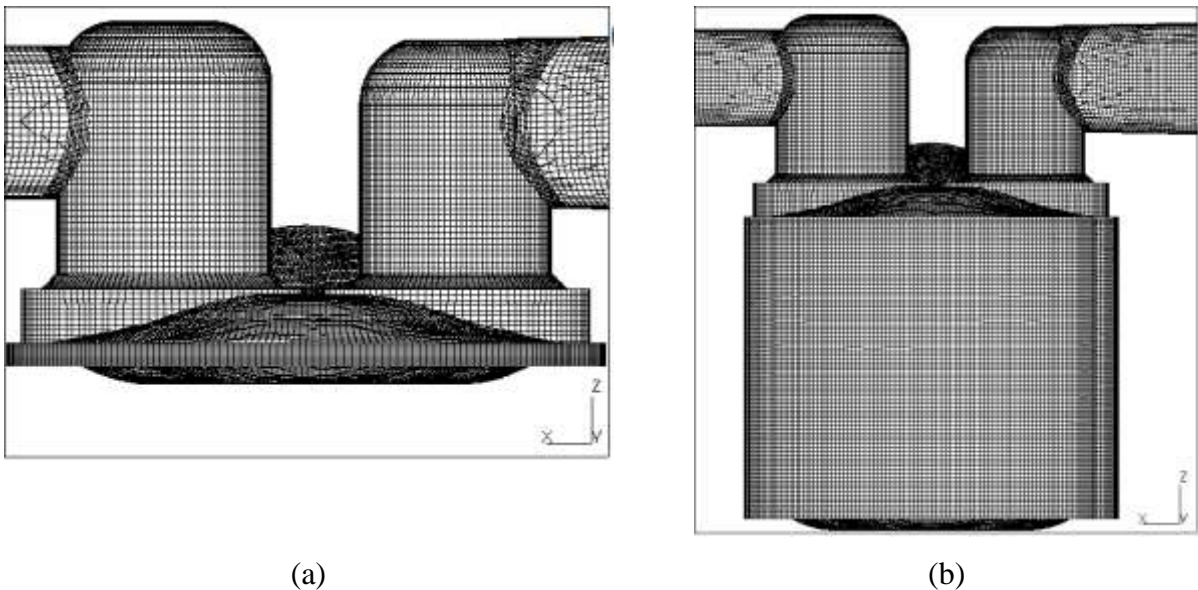


Figura 5.4 – Distribuição das células no cilindro: (a) PMS; (b) PMI.

Na etapa subsequente, o pré-processamento da fase de solução das equações diferenciais que descrevem o fenômeno, é realizada a implementação das condições de contorno e iniciais, e a definição dos parâmetros de solução numérica. Nas análises, empregou-se nas superfícies a condição de temperatura prescrita, ou seja, nos coletores e válvulas de admissão e exaustão a temperatura é igual a 350 K. Para a superfície da parte superior horizontal do cilindro (câmara de combustão) a temperatura atribuída foi de 450 K, no cilindro 350 K, na superfície do pistão 300 K e na superfície que representa a vela de ignição a temperatura é de 600 K, temperaturas sugeridas para combustão em motores ciclo Otto quando não se tem o conhecimento do valor real [Star-cd, 2014]. Em relação à transferência de calor próxima à superfície, admitiu-se a temperatura prescrita e um valor para a resistência térmica de $0,004 \text{ m}^2\text{K/W}$, isto é, condição de terceira espécie [Patankar, 1980; Barata *et al.*, 2008a ; Barata *et al.*, 2008b ; Barata *et al.*, 2009; Zancanaro, 2010]. Por fim, para as condições de entrada do escoamento têm-se como pressão ambiente na admissão o valor de 101,35 kPa (1 atm) e temperatura de 293,15 K, e para a exaustão pressão ambiente de 101,35 kPa e 293,15 K [Star-cd, 2014]. A Figura 5.6 demonstra as condições de contorno em relação às equações de movimento e energia.

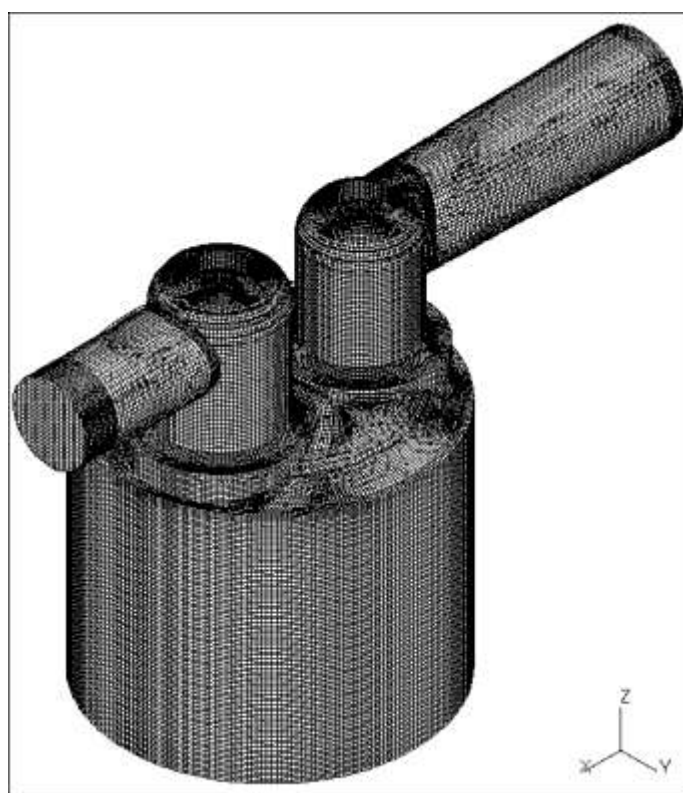


Figura 5.5 - Vista isométrica da malha hexaédrica *trimmed*.

Ao resolver o escoamento turbulento, é necessário atribuir condições de contorno também para a turbulência. Normalmente este valor é omitido da literatura ao considerar estudos em motores, em função da variação destes valores durante a análise (a variabilidade cíclica do escoamento é uns dos principais motivos). No entanto, o Star-cd, 2014, recomenda que a escala de comprimento seja de 10 % do diâmetro hidráulico da condição (geometria) de entrada, ou seja, para o coletor de admissão com diâmetro de 10 mm tem-se um valor de 1 mm. A exaustão possui diâmetro de 13 mm, implicando em uma escala de comprimento de 1,3 mm. Para o cilindro, utiliza-se a mesma percentagem, onde a maior dimensão que poderá gerar um vórtice durante o escoamento para o interior do mesmo, neste caso, será o diâmetro da válvula de admissão (15,915 mm). Conseqüentemente, a escala de comprimento é 1,5915 mm. Para a intensidade de turbulência é recomendado o valor de 0,5 a 1 %. Tais valores sofrem alterações durante o ciclo do motor, portanto utiliza-se os mesmos apenas quando não se conhece os valores reais. Todos os estudos numéricos realizados serão para uma rotação do eixo de manivelas de 3600 rpm.

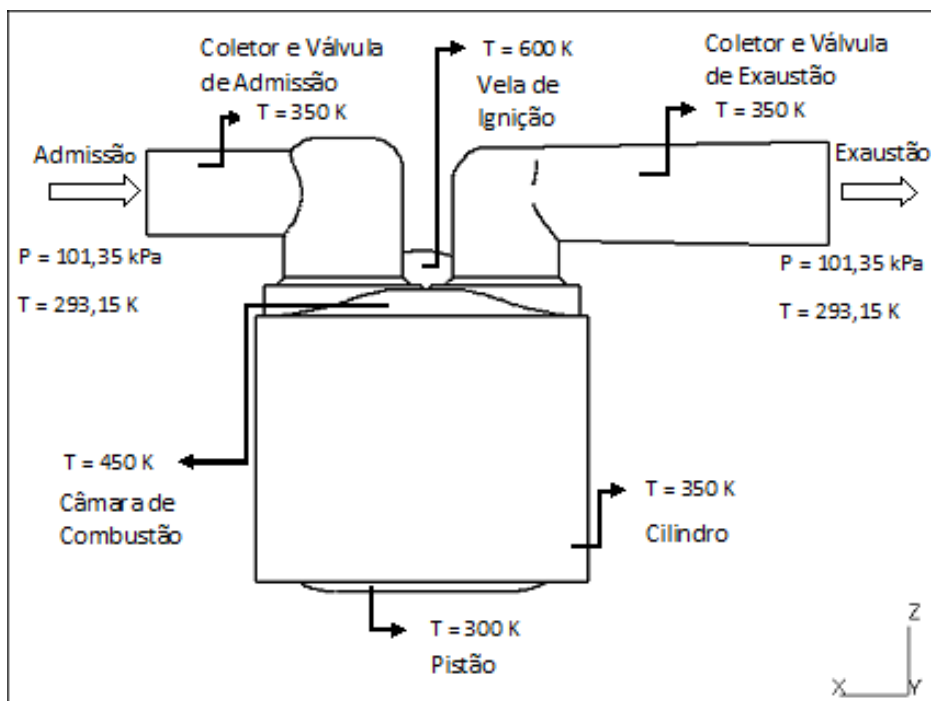


Figura 5.6 – Implementação das condições de contorno.

O mapa de abertura e fechamento das válvulas é apresentado na Figura 5.7. Pode-se observar o cruzamento de válvulas, que é considerado nas análises. A abertura máxima da válvula de admissão é de 2,82 mm em 110° após o PMS, e a válvula de exaustão 2,80 mm em

240° após o PMS. Os valores são obtidos a partir de medições efetivas do deslocamento da válvula.

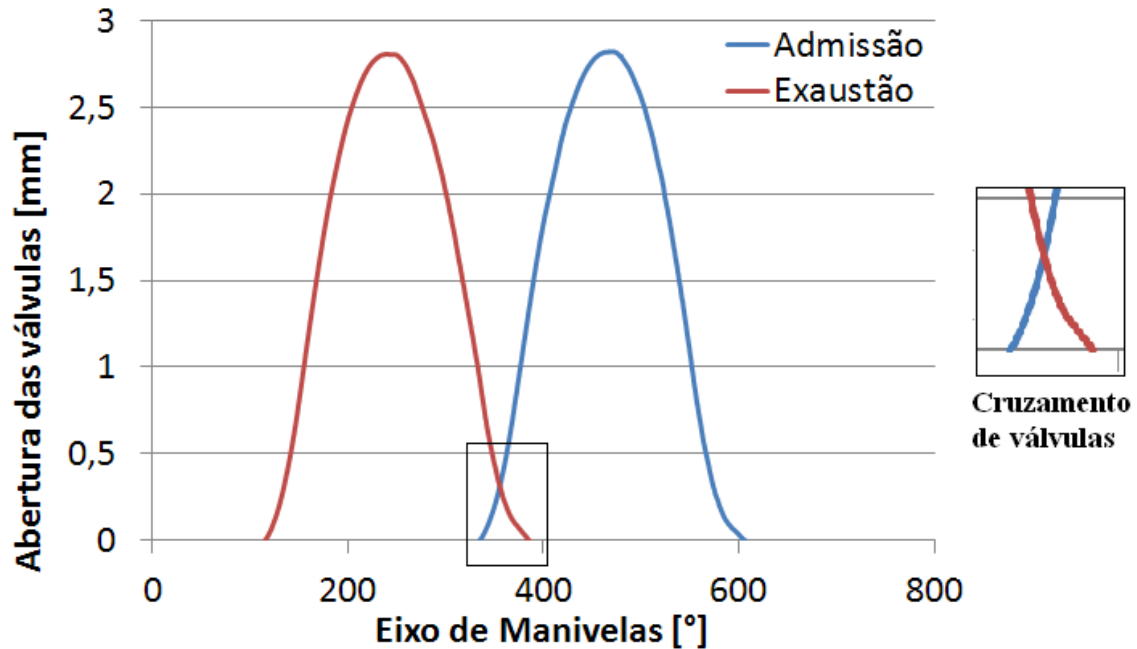


Figura 5.7 – Mapa de abertura e fechamento das válvulas

Na etapa final dos procedimentos de criação do modelo, deve-se definir as opções restantes para a solução numérica. Conforme já informado, o modelo de turbulência utilizado foi o $k-\omega$ SST, com aproximações de baixo número de Reynolds e tratamento híbrido próximo à parede. A função de interpolação utilizada para as equações de movimento, energia e transporte de k e ω foi a *Blended Differencing*, com fator de combinação de $\gamma = 0,5$ em relação ao método LUD, e para a densidade $\gamma = 0,05$ em relação ao método CD. O acoplamento pressão-velocidade foi resolvido pelo algoritmo PISO, com critério de convergência residual para as equações de transporte de 10^{-5} e número máximo de 4 correções. Ao considerar a combustão na análise, o critério residual para os escalares é de 10^{-10} [Star-cd, 2014].

Tratando-se de uma situação altamente transiente, foi adotado o passo de tempo de $0,05^\circ$ de giro do eixo de manivelas ($1,03135 \times 10^{-5}$ s) nas aberturas das válvulas e nos processos de compressão e expansão, enquanto que na fase de centelha e queima o passo de tempo é de $0,01^\circ$ do eixo de manivelas ($4,6296 \times 10^{-7}$ s). O Star-cd, 2014, sugere que durante a centelha elétrica, injeção e queima de combustível o passo de tempo deve ser da ordem de 1×10^{-6} s.

Embasando um estudo de combustão e interpretação do mecanismo, considera-se para a análise da combustão o modelo ECFM-3Z, considerando-se que seja pré-misturada homogênea (mistura combustível-ar admitida já misturada perfeitamente). O combustível utilizado é o gás metano (CH_4) com razão de equivalência estequiométrica ($\phi = 1$) para condição de contorno na admissão, ou seja, isto equivale a uma fração mássica de 0,055087 para o CH_4 , 0,22026 para o O_2 e 0,724653 para o N_2 . A condição de contorno na exaustão é $\phi = 0$, isto é, fração mássica de 0,151448 para o CO_2 , 0,12399 para a H_2O e 0,724562 para o N_2 . A centelha acontece a 18 graus antes do PMS em relação ao curso de compressão, e considerando um atraso de ignição (*delay*) de 8 graus ($3,7037 \times 10^{-4}$ s), equivalente a valores de $A_{\text{ign}} = 0,8$ e $A_{2\text{ign}} = 0,8$ (Equação (3.90)). O valor de atraso de ignição depende do tipo de combustível queimado e rotação. Assim, os coeficientes tiveram que ser ajustados realizando simulações do período de centelha e máximo pico de pressão. A posição da centelha é $x = 0$, $y = -10$ mm e $z = 3,45$ mm, no motor empregado neste trabalho.

Como condição inicial para as simulações, foi considerada a pressão e temperatura para o cilindro, admissão e exaustão de 101,35 kPa e 293,15 K, respectivamente. Em relação ao escoamento reativo, foi assumido razão de equivalência igual a 1, $\phi = 1$, para o coletor de admissão e cilindro, e razão de equivalência igual a zero, $\phi = 0$, para o coletor de exaustão.

O recurso computacional utilizado para o processamento numérico foi uma estação de trabalho (workstation) com as características mostrada na Figura 5.8. Utilizou-se 12 processadores dedicados ao processamento das equações, e 4 processadores para geração da malha durante a evolução do ciclo. Esta configuração apresentou o menor tempo computacional, na ordem 25 dias por ciclo. A decomposição realizada neste trabalho é feita pelo método Metis (Copyright 1997, Regents of University of Minnesota).

Informações da CPU	
	Processador (CPU): Intel(R) Xeon(R) CPU X5690 @ 3.47 GHz
	Velocidade: 3.459,00 MHz
	Núcleos: 24
Informações da memória	
	Memória total (RAM): 47,2 GiB
	Memória livre: 25,3 GiB (+ 11,3 GiB de cache)
	Swap livre: 42,0 GiB

Figura 5.8 – Especificações técnicas da estação de trabalho.

5.2 Procedimento Experimental

Para a realização do experimento e consequente medição das grandezas desejadas, foi desenvolvido um dinamômetro através de um gerador de corrente elétrica. O eixo de manivelas do motor de combustão interna fora acoplado ao gerador, e a rotação desejada, de 3600 rpm, é estabilizada através da potência elétrica gerada, sendo esta dissipada em calor em resistências elétricas variáveis. Todos os dados de vazão mássica, pressão na câmara de combustão, posição da ignição em relação ao eixo de manivelas, e a relação ar/combustível foram adquiridos operando em carga plena. O pós-processamento foi realizado com o auxílio do programa LabView. A Figura 5.9 apresenta o diagrama de funcionamento da bancada de testes desenvolvida.

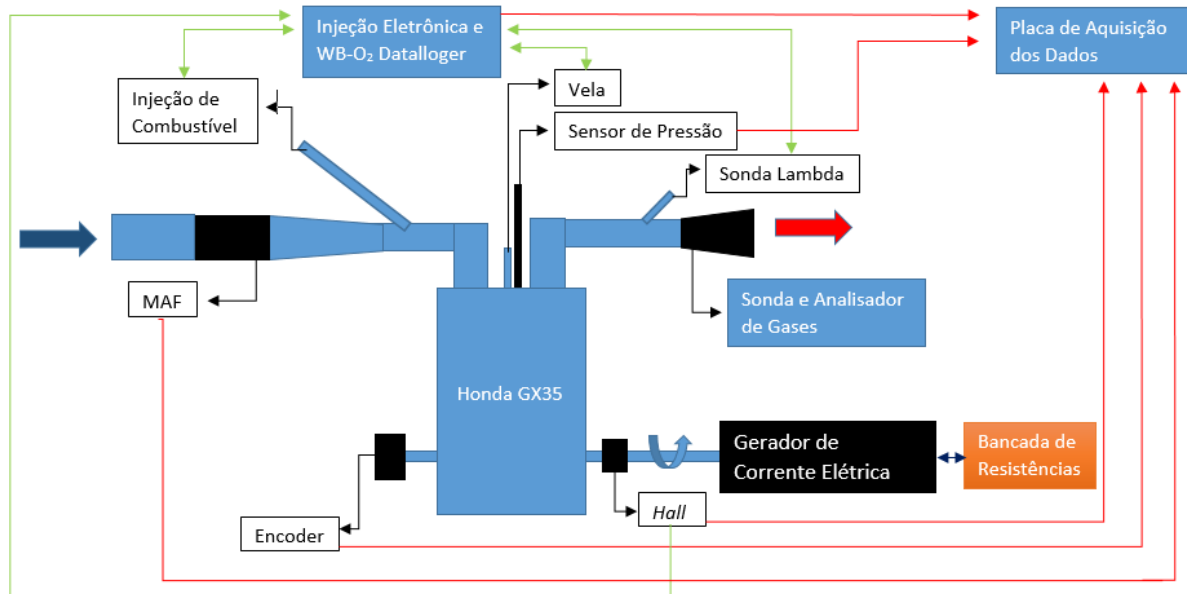


Figura 5.9 – Diagrama esquemático da montagem experimental com combustão.

A descrição dos instrumentos utilizados no aparato experimental e as características operacionais são apresentados nas seções subsequentes.

5.2.1 Medição da Vazão Mássica

Os resultados de vazão mássica de ar foram obtidos com um anemômetro de filme quente (MAF – *Measurement Air Flow*) de aplicação automotiva [Bosch 0 280 218 002]. O princípio de funcionamento deste sensor consiste na troca de calor do filme quente devido à passagem da massa de ar de admissão. [Bosch, 2012]. Um sistema eletrônico híbrido avalia a

temperatura do filme através da mudança da resistência elétrica e fornece a tensão elétrica necessária para manter o filme aquecido [Beckwith *et al.*,1993]. Esta tensão elétrica é medida no sistema de aquisição de dados e convertida em vazão mássica de ar através da curva de calibração do anemômetro. Esta curva foi obtida utilizando uma placa de orifício conforme especificado pela norma NBR ISO 5167-1. A Figura 5.10 ilustra, esquematicamente o procedimento de calibração do sensor de vazão mássica de ar [Rech, 2010].

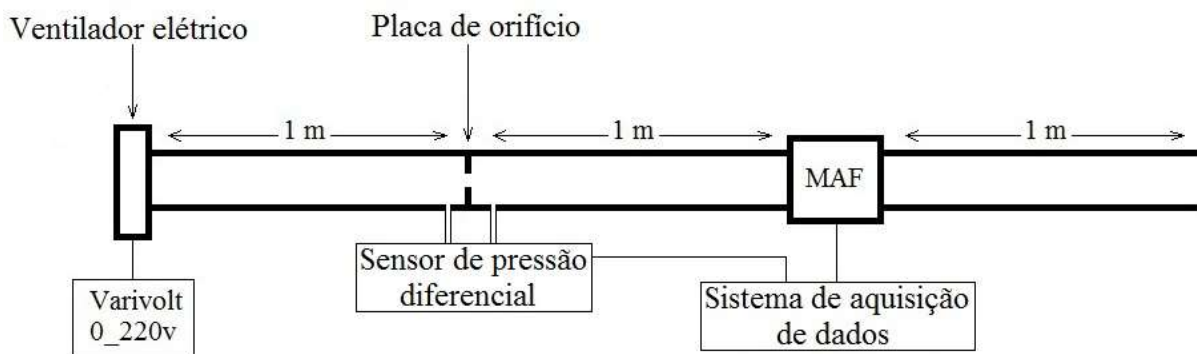


Figura 5.10 – Diagrama esquemático da calibração do MAF [Rech, 2010].

5.2.1.1 Diferenças Geométricas entre os Coletores de Admissão Simulado Numericamente e Ensaiado Experimentalmente

O domínio computacional considerado na simulação numérica compreende apenas uma parcela do duto de admissão, isto é, apenas o volume compreendido no modelo mostrado na Figura 5.1. Já o domínio da experimentação é o da Figura 5.11. Observa-se que além de possuir uma maior extensão, em relação ao considerado no estudo numérico, também possui uma perda de carga localizada, decorrente da adaptação do sensor MAF. Estas características não são representadas no estudo numérico, em virtude da limitação de disponibilidade computacional.

5.2.2 Aquisição de Dados

Os valores de tensão elétrica de todos os sensores utilizados no experimento foram adquiridos através de uma placa conversora A/D (*National instruments* 6363) controlada pelo seu software original [LabView, 2010]. Esta placa possui 32 entradas analógicas com taxa de aquisição máxima de 1 MHz quando operada na função multicanais [National Instruments, 2014].

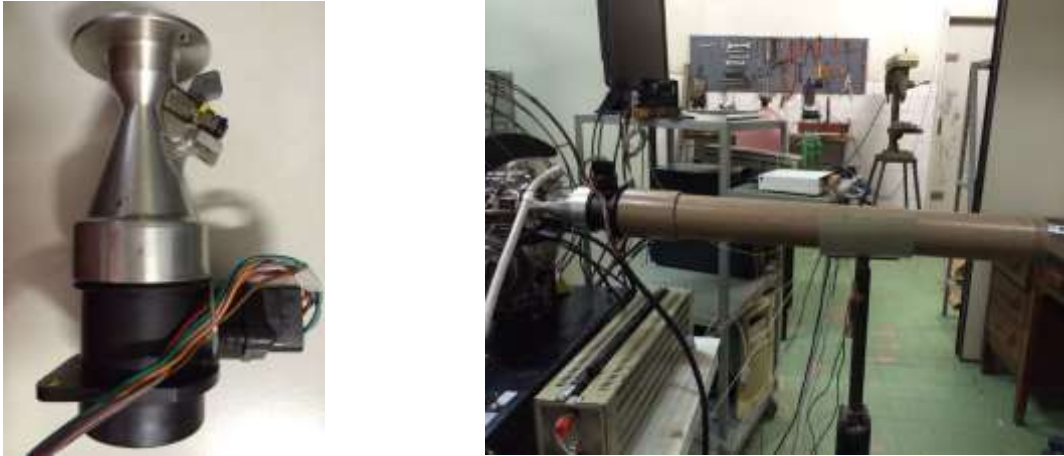


Figura 5.11 – Canal de admissão experimental.

5.2.3 Medição da Posição Angular

A posição angular do eixo de manivelas foi medida com um *encoder* do tipo incremental [Autonics E40S-6-2048-6-L-5, 2012], mostrado na Figura 5.12. A resolução do *encoder* utilizado é de 2048 pulsos por volta, fornecendo um incremento de posição angular a cada 0,175 graus do eixo de manivelas. Além da medição de posição angular, este sensor foi utilizado como o *trigger* externo para que a aquisição seja feita, ou seja, a cada incremento do *encoder* é coletada uma amostra de todos os sensores. Portanto, com a resolução angular de 0,175 graus, a taxa de aquisição de dados para a rotação utilizada é de aproximadamente 123 kHz para cada sensor. Esta metodologia de aquisição de dados é adequada para a aplicação em motores, visto que há variações na velocidade angular do eixo de manivelas ao longo do ciclo completo do motor.



Figura 5.12 – *Encoder* incremental.

5.2.4 Determinação do Ponto Morto Superior Geométrico

O ponto morto superior geométrico foi referenciado conforme metodologia descrita por Oliveira *et al.*, 1996. Esta metodologia sugere que o ponto morto superior seja definido entre a média de dois ângulos simétricos opostos ao ponto morto superior, em que a variação do deslocamento do êmbolo tenha resolução suficiente em relação à variação da posição angular do eixo de manivelas. Para a medição, utilizou-se um relógio comparador analógico Starret 3025-481, com incerteza de $\pm 0,01\text{mm}$ (Figura 5.13a) [Starret Indústria e Comércio LTDA, 2011], montado sobre a face do êmbolo, e o *encoder* acoplado ao eixo de manivelas. A posição utilizada foi de $\pm 25^\circ$ do eixo de manivelas, e foi referenciada eletronicamente com um sensor do tipo *hall*, fixo ao bloco do motor (Figura 5.13b) [Alegro Microsystem A1102, 2012]. Este sensor, baseado no princípio de um semicondutor, fecha o circuito quando sujeito a um campo magnético perpendicular à passagem da corrente elétrica. No eixo do motor fixou-se um ímã, propiciando a cada volta uma janela de tensão de subida de 0 a 5 V. Utilizou-se 3 V para referenciar o ponto morto superior e informar para o sistema de aquisição de dados onde começa o ciclo, tomando a posição do *encoder* como 0° em relação ao eixo de manivelas.



(a)



(b)

Figura 5.13 – Instrumento de medição (a) relógio comparador, (b) sensor *Hall*.

5.2.5 Sensor de Pressão

A pressão na câmara de combustão foi medida, ao longo do tempo, na face interna da parede do cabeçote, através de um sensor ótico Oprand[®], modelo Q32294-Q. O seu transdutor opera pela modulação do reflexo de um feixe de luz por uma membrana espelhada, sujeita à deformação pela variação da pressão interna no cilindro e conectada a um diodo emissor de luz por uma fibra ótica. A intensidade do reflexo de luz é comparada com a intensidade emitida por um circuito eletrônico e amplificada. A tensão elétrica de saída do amplificador é então relacionada à pressão atuante na membrana do sensor [Włodarczyk 1998a,b, 1999a,b]. A faixa de frequência de resposta e medição é de 0,1 Hz a 20 kHz e 0 a 3000 psi, respectivamente, com erro de $\pm 1\%$ no fundo de escala para medições com combustão. Rech, 2010, demonstrou que o sensor possui um tempo de resposta inferior ao necessário (mais rápido) para medição do evento. Mas deve-se observar que a faixa de temperatura na sua interface da medição está limitada ao intervalo de -20°C a 125°C . Para atender a essa restrição e preservar o funcionamento do sensor, o fabricante sugere a instalação mostrada na Figura 5.14, a seguir.

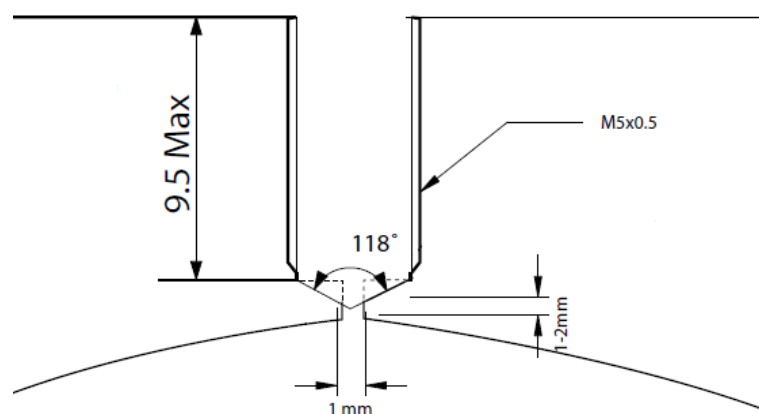


Figura 5.14 – Instruções para adaptação do sensor de pressão [Oprand Incorporated, 2014].

O sinal de saída do sensor está na faixa de 0 a 5 V, e é relacionado com a pressão por uma curva de calibração pré-determinada pelo fabricante. Segundo a Oprand Incorporated, 2014, a Equação (5.1) representa a relação entre a tensão e a pressão para o sensor.

$$p = \frac{(\text{Valor medido} - 0,5)}{0,00133} \text{ [psi]} \quad (5.1)$$

A Figura 5.15 apresenta o sensor adaptado no motor Honda GX35, seguindo as instruções do fabricante. Devido às características geométricas do motor, o sensor foi colocado ao lado da vela de ignição. Observa-se na Figura 5.15(b) o ponto de medição da pressão.

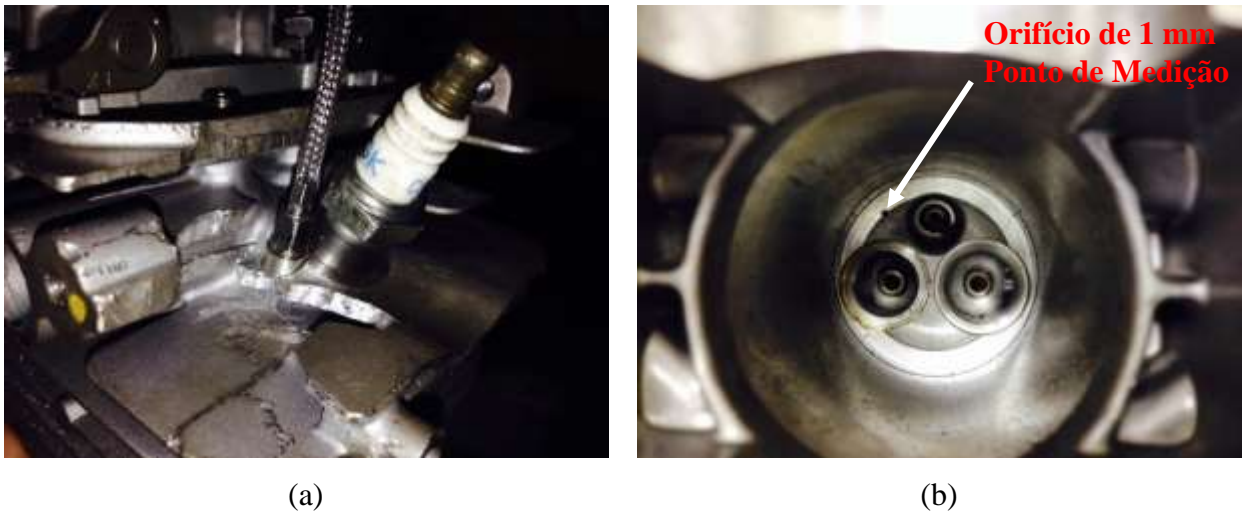


Figura 5.15 – Adaptação do sensor de pressão (a) vista externa, (b) vista interna.

5.2.6 Relação Ar-Combustível

Para medir a relação ar-combustível foi utilizado um sensor de oxigênio de banda larga modelo Bosh LSU 4.2 [Bosh Motorsport, 2014]. O condicionamento e leitura do sinal do sensor de oxigênio é realizado através de um WB-O₂ Datalogger, fabricado pela Fueltech [Fueltech WB-O₂ Datalogger, 2014], ilustrados na Figura 5.16. Sua leitura está na faixa de 0 a 5 Volts e correlacionada à relação de mistura ar-combustível lambda λ ($\lambda = 1/\phi$), isto é, para uma faixa de $0,59 \leq \lambda \leq 1,3$. A Equação (5.2) representa a correlação da tensão com o lambda para faixa de mistura mencionada, sendo que o instrumento pode estender o valor do limite superior [Fueltech WB-O₂ Datalogger, 2014]

$$\lambda = \frac{1}{\phi} = 0,1413 \cdot (\text{Valor da leitura em volts}) + 0,6217 \quad (5.2)$$

Segundo a Bosh Motorsport, 2014, a acuracidade do sensor de banda larga para uma leitura de λ de 0,8 é de $0,8 \pm 0,01$ e para λ de 1 é $1,016 \pm 0,007$. A calibração entre sensor e condicionador é realizada de forma automática pelo sistema. Desta forma, não é necessária a intervenção do usuário.



Figura 5.16 – Sensor de oxigênio de banda larga (a) Sonda de oxigênio, (b) WB-O₂ Datalogger [Bosh Motorsport, 2014 ; Fueltech WB-O₂ Datalogger, 2014].

5.2.7 Sistema de Injeção Eletrônica

Um sistema de injeção eletrônica programável (RacePRO-1Fi), fabricado pela empresa Fueltech, foi utilizado para controlar a ignição e a injeção de combustível. A injeção eletrônica utiliza o mesmo sinal do sensor tipo Hall, descrito na seção 5.2.4, para identificar o PMS e medir a rotação do motor. Este modelo de injeção eletrônica não identifica as fases do motor ao longo de um ciclo completo. Portanto, para garantir o funcionamento a eletroválvula injetora e o sistema de ignição são acionados a cada volta da árvore de manivelas.

A eletroválvula injetora utilizada é fabricada pela empresa Magneti Marelli (modelo 50104502). O controle da mistura ar-combustível não é realizado pelo sistema de injeção eletrônica, mas sim pelo usuário, necessitando então um ajuste manual de uma válvula de controle de vazão para obter o valor de λ desejado. O parâmetro utilizado pelo sistema de injeção para variar a mistura ar-combustível corresponde ao tempo com que a eletroválvula injetora permanece aberta. Este tempo de abertura, nas condições do teste, foi de $3,20 \times 10^{-6}$ s.

O sistema de ignição capacitiva utilizado é fabricado pela empresa Bosch (modelo F 000 ZS0 105). Neste caso, a injeção eletrônica controla dois parâmetros: o tempo de carga da bobina e o instante com que a centelha é disparada. Para o tempo de carga da bobina foi utilizado o valor de $3,60 \times 10^{-6}$ s. Já o instante em que a centelha é disparada foi ajustado para 18 graus antes do PMS. Estes dois parâmetros foram coletados pelo sistema de aquisição de dados, a fim de monitorar o funcionamento do sistema de ignição.

5.2.8 Análise dos Gases de Exaustão

A avaliação dos gases de exaustão foi feita através de um analisador de gases da NAPRO® (modelo PC-Multigás), constituído de um conjunto de análise de CO, HC e CO₂ pelo processo de infravermelho não dispersivo, e O₂ e NO pelo processo eletroquímico [NAPRO Eletrônica Industrial LTDA, 2012]. Os dados de verificação em relação ao gás padrão do analisador são mostrados no ANEXO C.



Figura 5.17 – Analisador de gases [NAPRO Eletrônica Industrial Ltda, 2012].

Antes da utilização do analisador de gases, há a necessidade de alguns procedimentos para garantir medições corretas, dentro de sua margem de erro intrínseca. A primeira etapa compreende o aquecimento do instrumento de medição. Após, é necessário realizar o teste de vedação, que consiste em verificar possíveis entradas de ar falso. A sonda de captação dos gases é tampada, aguardando o teste de vedação. Após as verificações iniciais, é realizada a calibração do ponto de zero do analisador, passando-se a seguir para a rotina de amostragem. Ambos os processos são automáticos, exceto a intervenção do usuário na vedação da sonda. Subsequentemente, a sonda de amostra pode ser adicionada no escapamento para a leitura dos gases. O tempo de leitura de cada amostra é de 4 segundos. As escalas de medição em relação ao volume são, para o CO (0 - 10 %), CO₂ (0 - 20%), HC (0 - 2000 ppm (parte por milhão)), O₂ (0 - 25 %), NO (0 - 5000 ppm), lambda (0-9,99) e relação ar-combustível 0 - 99,99 %.

5.2.9 Programa de Aquisição e Tratamento dos Dados

Utilizou-se um programa de aquisição e tratamento de dados para realizar a leitura e armazenamento dos instrumentos mencionados. O programa possui uma estrutura em bloco e sua interface é desenvolvida no LabView [LabView, 2010]. Detalhes das características construtivas dos blocos e funcionalidades são demonstrados em Wildner, 2010.

5.2.10 Incerteza da Medição da Vazão Mássica de Ar

O método utilizado para quantificar o erro associado à medição de vazão de massa de ar, denominado *Propagação de Incertezas*, foi proposto por Kline e McClintock, 1953. Este método consiste no somatório da incerteza de medição de cada variável utilizada para calcular uma determinada grandeza, conforme a equação [Beckwith, 1993],

$$\sigma_y = \sqrt{\left(\frac{\partial y}{\partial x_1} \sigma_1\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial x_2} \sigma_2\right)^2 + \dots + \left(\frac{\partial y}{\partial x_n} \sigma_n\right)^2} \quad (5.3)$$

onde σ_y representa a incerteza da medição, $\partial y/\partial x_i$ a derivada parcial da equação y em função da grandeza x_i , e σ_i representa a incerteza total da medição de x_i .

A incerteza total depende da incerteza da medição e incerteza da medida. A incerteza da medição (P_x), refere-se à incerteza com base em um número finito de amostras. Já a incerteza da medida (B_x), está relacionada ao instrumento de medição utilizado, determinada pelo fabricante do instrumento. Como citado anteriormente, a curva de calibração do sensor de massa de ar foi obtida através de uma placa de orifício, de acordo com a norma ABNT NBR ISO 5167-1. Portanto, a equação utilizada para quantificar a massa de ar (Q) é uma função do diâmetro do tubo (D), diâmetro do orifício (d), temperatura do fluido (T) e a pressão diferencial (P), a montante e a jusante da placa de orifício. Logo, antes de calcular a propagação da incerteza deve-se calcular a incerteza da medição de D e d .

Para determinar os diâmetros do tubo e do orifício foi utilizado um paquímetro digital com resolução de 0,01 mm, sendo que para cada caso foram realizadas 15 medições. Considerando uma distribuição normal, pode-se definir a incerteza da medição como [Balbinot e Brusamarello, 2006]

$$\Delta = \frac{z\sigma}{\sqrt{n}} \quad (5.4)$$

onde σ é o desvio padrão, z o intervalo de confiança obtido através da tabela *t-student*, que para o caso de 15 medições e um nível de confiança de 99 % é igual a 2,624, e n o número de amostras.

Após a determinação da incerteza da medida e medição, deve-se associá-las, a fim de obter a incerteza total (σ_n) da medição dos diâmetros, através da equação a seguir [Beckwith, 1993]

$$\sigma_n = \sqrt{Px^2 + Bx^2} \quad (5.5)$$

Finalmente, com as incertezas devidamente determinadas, torna-se possível o cálculo da incerteza do resultado do sensor de massa de ar da seguinte forma

$$\Delta Q = \sqrt{\left(\frac{\partial Q}{\partial D} \Delta D\right)^2 + \left(\frac{\partial Q}{\partial d} \Delta d\right)^2 + \left(\frac{\partial Q}{\partial P} \Delta P\right)^2 + \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \Delta T\right)^2} \quad (5.6)$$

Resolvendo a equação para as condições citadas anteriormente, a incerteza do resultado experimental obtida foi de 4%.

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

A simulação transiente multidimensional é empregada para caracterizar a evolução da estrutura do escoamento turbulento e reativo nos coletores e no cilindro, considerando a combustão pré-misturada de gás metano. A evolução dos campos médios (daqui em diante o termo "médio" será negligenciado) da velocidade e pressão são apresentados com o objetivo de entender o mecanismo físico e a estrutura do escoamento predominante neste tipo de aplicação, enquanto que os valores globais dos escalares foram demonstrados com o objetivo de apresentar características do processo de combustão. Resultados numéricos e experimentais da vazão mássica de ar na admissão, pressão na câmara de combustão e análise de gases são apresentados e comentados.

Visando analisar os efeitos dinâmicos do escoamento na admissão, os resultados para pressão e velocidade são apresentados no instante em que o pistão atinge a velocidade máxima, pois neste ponto ocorrem as situações extremas em relação à complexidade do escoamento. A velocidade máxima se dá aproximadamente a 75° do eixo de manivelas após o PMS. O curso de abertura da válvula de admissão neste momento é 2,616 mm. Os resultados da simulação foram apresentados no plano formado pelo corte A-A passando pelo centro das válvulas, como mostrado na Figura 6.1(a). Subsequentemente, ao considerar a combustão os resultados são mostrados a partir da ignição (18° antes PMS) e intercalados em 10° uns aos outros. O plano B-B, representado na Figura 6.1(b), contém o centro do ponto de ignição geométrico (eletrodo da vela) e o cilindro

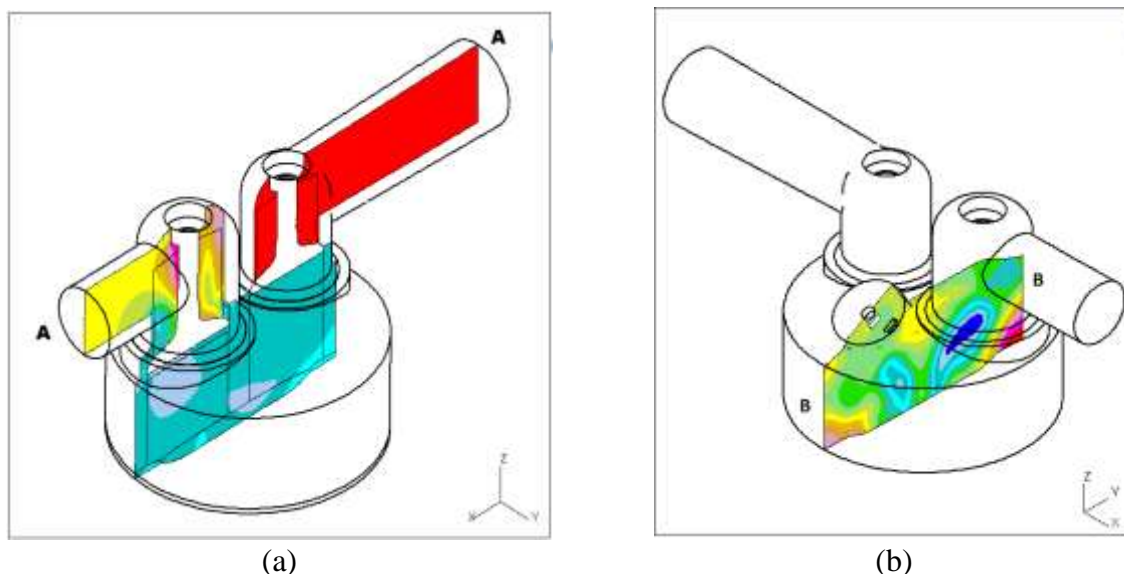


Figura 6.1 – Cortes (a) A-A, (b) B-B.

Outros planos foram utilizados e identificados durante o texto, para auxiliar a compreensão dos fenômenos transientes envolvidos. Por fim, gráficos dos parâmetros em estudo em função da evolução do eixo de manivelas foram plotados e comentados.

6.1 Validação da Metodologia

Nessa seção são apresentadas comparações entre resultados numéricos e experimentais, que permitiram validar as metodologias aplicadas. Os resultados experimentais foram adquiridos para uma sequência de 12 ciclos, e seu valor médio é comparado com os resultados numéricos.

A Figura 6.2 apresenta os resultados da rotação experimental, onde seu valor médio é de 3591 rpm, e desvio padrão de 38,25 rpm. Observe-se a existência de dois picos em relação à velocidade média em cada ciclo; o superior (aproximadamente 3630 rpm) que é proveniente de um incremento da velocidade angular causado pelos efeitos de expansão e exaustão dos gases, e uma diminuição da rotação derivada do curso de compressão dos gases. Essa característica não está presente no estudo numérico, pois a rotação é exatamente 3600 rpm. Esse desvio atribui-se à dificuldade de frear o motor a uma rotação constante, e à variabilidade cíclica, decorrente tanto dos efeitos dinâmicos, quanto à alteração na injeção de combustível de ciclo a ciclo.

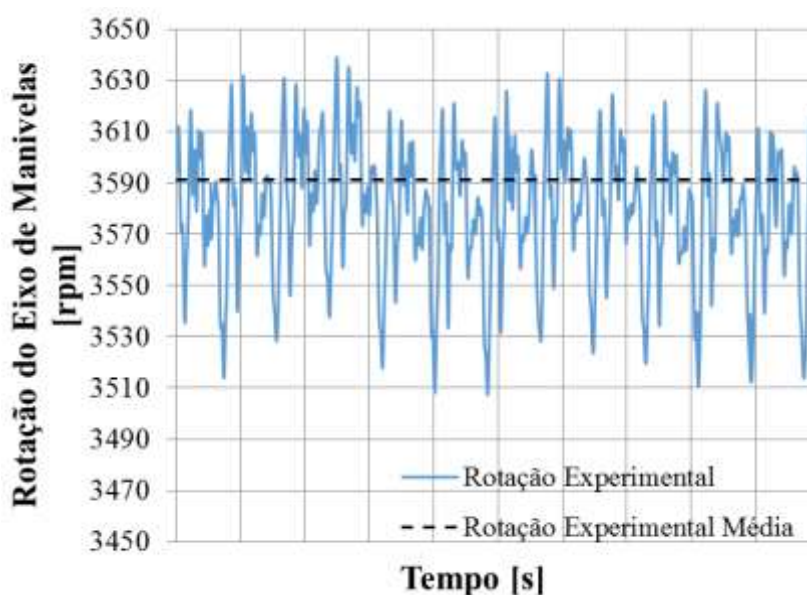


Figura 6.2 – Rotação experimental.

A variação do lambda (λ) no estudo experimental durante os ciclos é representada na Figura 6.3. O valor médio é de $\lambda = 0,9770$, com desvio padrão de 0,0192. Na simulação numérica manteve-se $\lambda = 1,0023$ até o início da queima de combustível.

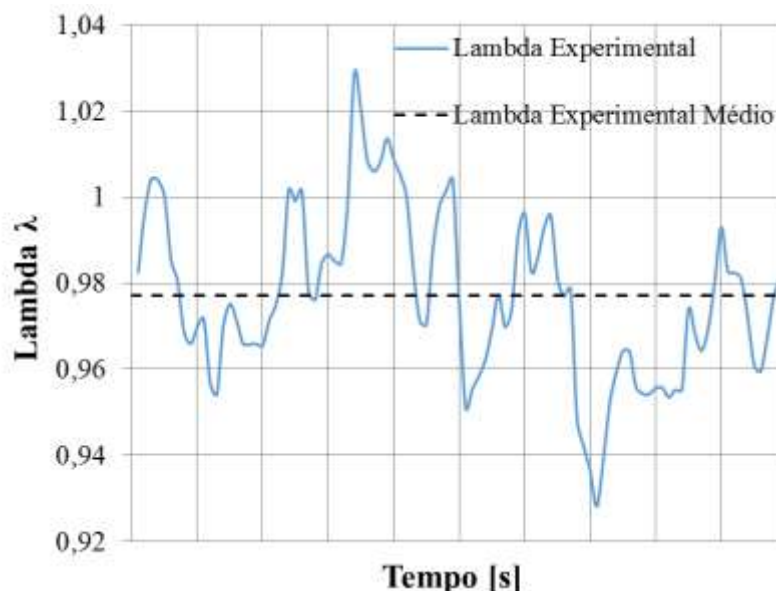


Figura 6.3 – Lambda experimental.

Buscou-se manter a rotação e o lambda iguais entre os estudos experimental e numérico, a fim de se obter um comparativo adequado. Porém os efeitos dinâmicos e reativos, associados à complexa análise do motor, impossibilitou essa igualdade. Assim, os valores dos parâmetros sofrem variações superiores e inferiores às condições do estudo numérico, viabilizando assim a comparação dos resultados globais.

6.1.1 Características do Escoamento e Vazão Mássica de Ar

A Figura 6.4 mostra a estrutura do campo de velocidades a 435° , no corte A-A. Neste ponto, o escoamento é admitido através do coletor, em forma de um forte jato anelar cônico e descolado da válvula. No estreitamento entre a válvula e sua sede (a sede é a área de contato entre a válvula e o cabeçote possibilitando uma vedação entre o coletor e o cilindro), observa-se altas velocidades. Este jato gera regiões com comportamentos distintos dentro do cilindro. O escoamento que adentra no cilindro pelo lado esquerdo escoava sobre a sua parede até a superfície do pistão, induzindo a criação de um vórtice toroidal com sentido anti-horário. Este vórtice é ainda intensificado pelo escoamento que retorna da cavidade do pistão. O jato do

lado direito adentra o cilindro com as maiores velocidades, aproximadamente 116 m/s, e diminui sua velocidade gradativamente até atingir o pistão, formando dois vórtices; no canto direito superior, característicos de motores alternativos, e sobre o meio do pistão [Heywood, 1988]. Sobre a sede da válvula existe um descolamento e, sobre o lado esquerdo da válvula, uma recirculação. Estas características de descolamento e recirculação do escoamento na região da válvula são decorrentes da geometria da válvula, como fator principal.

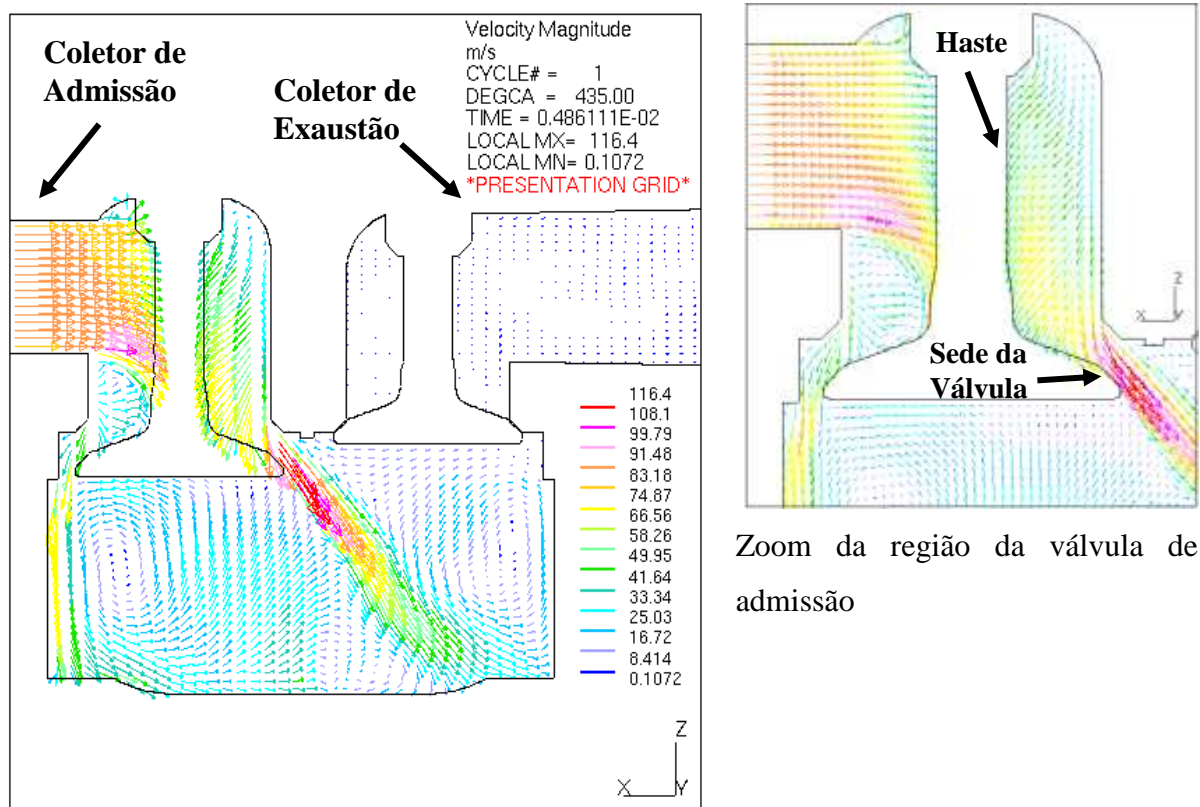
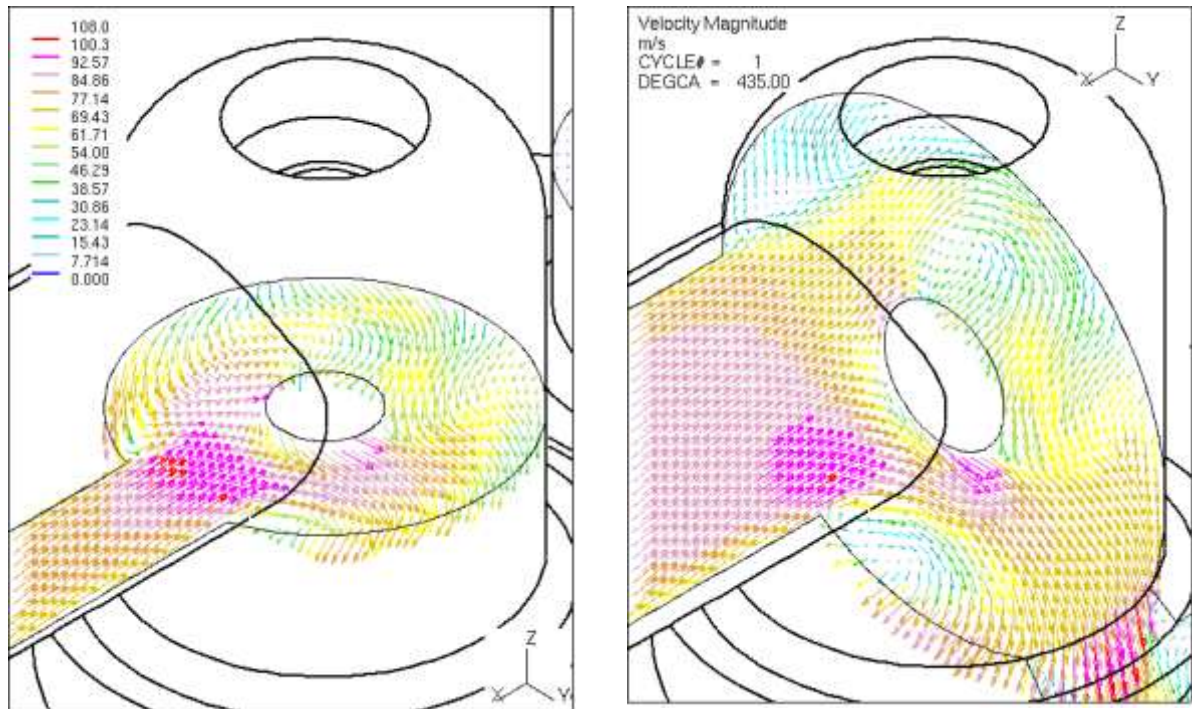


Figura 6.4 – Campo vetorial da velocidade em 75° após PMS, no corte A-A.

A Figura 6.5 (a) apresenta detalhes do escoamento em torno da haste da válvula. Nota-se que não há um padrão definido de sentido, conseqüentemente gerando recirculações que possivelmente contribuem para uma diminuição da vazão mássica admitida. Esta forma de escoamento é encontrada em motores com coletores de entrada direta (Figura A.1 (b)) devido à interação da mistura ar-combustível com as paredes da válvula e coletor. A Figura 6.5 (b) apresenta um corte com inclinação de 45° em relação aos planos Y-Z, demonstrando a intensidade do vórtice gerado sobre o lado esquerdo da válvula, em função da mudança de sentido do escoamento, provocando uma região de baixa pressão e descolamento da camada limite.



(a)

(b)

Figura 6.5 – Campo vetorial da velocidade em torno da haste em 75° após PMS

(a) plano X-Y, (b) Plano Y-Z a 45° de inclinação.

O campo vetorial da velocidade, em relação ao corte B-B, é apresentado na Figura 6.6, onde se observa a formação de duas grandes recirculações com sentidos de rotação contrários, derivadas, principalmente do formado do pistão, e intensificadas pelo escoamento. Estes dois vórtices atuando com centros de rotação perpendicular ao eixo do cilindro dando origem ao movimento conhecido com *tumble x* (Anexo A). Esse padrão de movimento começa a se formar durante o curso de admissão, e tem grande importância para auxiliar na homogeneidade da mistura ar-combustível. Os maiores valores de velocidade se encontram alinhados ao centro do cilindro, devido ao jato principal que o adentra. Observe-se que este jato não possui um sentido paralelo ao eixo do cilindro. Logo, os vórtices abaixo do jato tenderam a diminuir com o movimento descendente do pistão, em função das maiores velocidades estarem perpendiculares aos seus eixos de rotação. O escoamento assume então uma dominância no plano X-Z. Próximo da região de ignição há baixas velocidades, em consequência da restrição no escoamento gerada pelo eletrodo da vela. Nesta região é desejável se ter uma boa mistura de ar-combustível, embora as baixas velocidades possam afetar a homogeneidade.

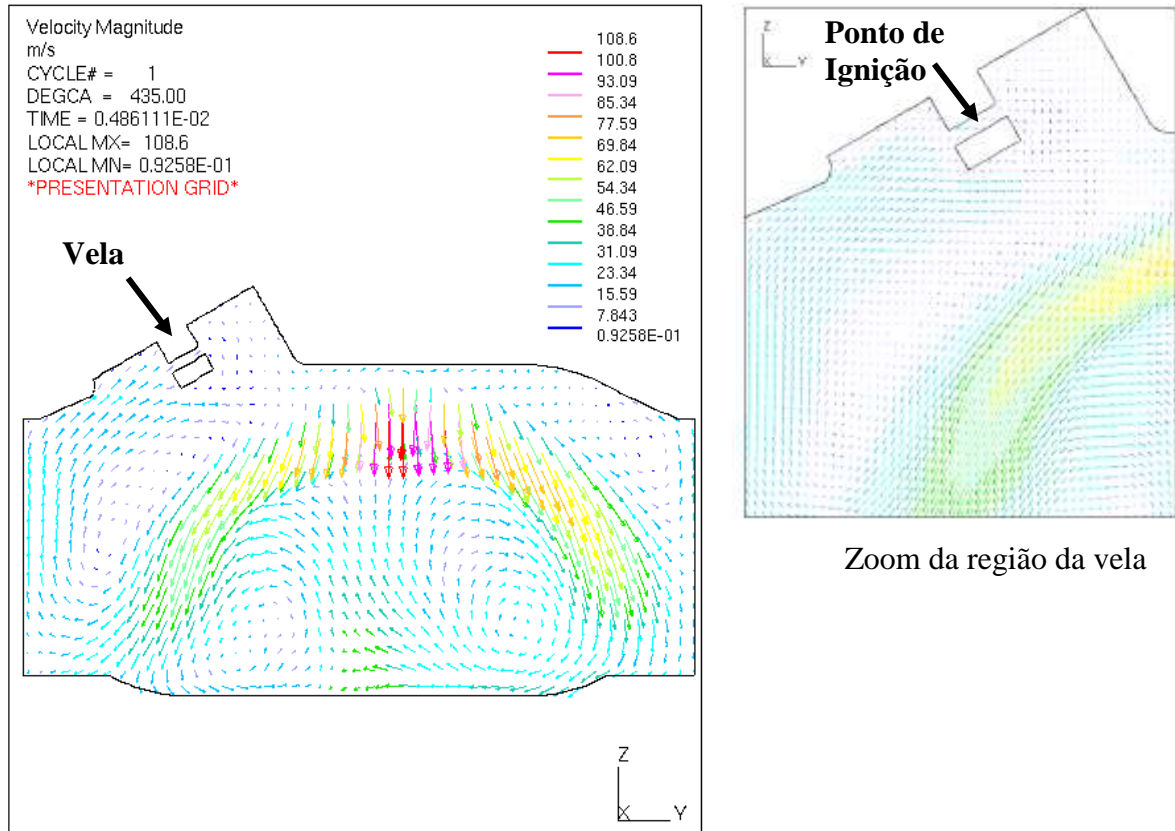


Figura 6.6 – Campo vetorial da velocidade a 75° após PMS.

A Figura 6.7 ilustra a evolução da vazão mássica de ar em função do ângulo do eixo de manivelas. No PMS (360°) o pistão inicia sua trajetória descendente, produzindo uma depressão no interior do cilindro que causa um forte aumento da vazão de ar, associada também à progressiva abertura da válvula de admissão. A vazão máxima determinada pelo experimento é de 4,35 g/s a 475°, enquanto que na simulação numérica o valor máximo foi de 6,95 g/s a 443°. Ao comparar os resultados, existe uma considerável discrepância entre os resultados. O fator principal desta disparidade está associado as diferentes perdas de cargas presentes entre os estudos, conforme já descrito no item 5.2.1.1. O coletor experimental, mostrado na Figura 5.11, além de possuir uma maior extensão, possui uma perda de carga localizada, decorrente da adaptação do sensor MAF. Estas características não são representadas no estudo numérico, em virtude da limitação computacional. Portanto, obteve-se um maior valor de vazão de ar para o estudo numérico. A defasagem entre os picos de máximo atribui-se à influência da conservação de pressão estática no coletor ser superior no numérico (menores perdas), proporcionando maiores velocidades e, conseqüentemente, maior massa de ar foi admitida no tempo. Após atingirem os picos de máximo, há uma posterior variação da vazão devida à presença de efeitos dinâmicos e recirculações na zona de entrada.

Subsequentemente, o valor da vazão decai devido à equalização das pressões (coletor-cilindro) e fechamento da válvula de admissão. Diante do fechamento da válvula de admissão (em 588°) os valores de vazão mássica de ar são nulos, pois para o código numérico há a condição de impermeabilidade na sede da válvula, isto é, não passaram efeitos do escoamento sobre a válvula. Os resultados experimentais mostram duas amplitudes positivas na evolução da vazão após o fechamento da válvula, na forma de ondas de reflexão com frequência constante dentro do coletor de admissão, devido à inércia dos gases, gerando um escoamento em direção à atmosfera e retornando em direção à válvula. Observa-se que após o fechamento da válvula de admissão as amplitudes positivas da vazão mássica de ar foram superiores as amplitudes negativas, o que indica que a massa não é conservada. Logo, para um melhor entendimento das causas deste fenômeno, realizou-se um estudo de ressonância acústica do duto de admissão. Segundo Falcão *et al.*, 2012, a oscilação da vazão ocorre na mesma frequência de ressonância da pressão. De acordo com Kinsler, 1980, para dutos com uma extremidade aberta e outra fechada a frequência natural pode ser calculada através da razão entre a velocidade do som no meio e de quatro vezes o comprimento do duto. Considerando os dois picos de vazão, após o fechamento da válvula de admissão, como sendo um ciclo de oscilação completo e convertendo o ângulo do eixo de manivelas em tempo, determinou-se a frequência de ressonância de 98,6 Hz. Para esta frequência o comprimento do duto de admissão deve ser na ordem de 0,86 m, o que está de acordo com o duto utilizado no experimento. Portanto, embora o fabricante afirme que o anemômetro utilizado meça vazão nos dois sentidos do escoamento [Bosch, 2012], nota-se que não está sendo capaz de medir corretamente o escoamento na direção da atmosfera, e subestima a vazão neste sentido. Como conclusão, subentende-se que os picos inferiores deveriam ter amplitudes negativas maiores, para respeitar a conservação de massa, o que não está acontecendo, em função do sensor MAF não representar corretamente a medição no sentido do escoamento contrário ao enchimento do motor (contrafluxo).

A Figura 6.8 mostra o padrão de movimento da mistura no cilindro durante o ciclo do motor. Analisando o comportamento do *tumble* x , após 360° o seu valor aumenta devido à abertura da válvula de admissão (o sinal negativo significa que o movimento está no sentido anti-horário) e decai ao longo da evolução do ciclo. Para o movimento com rotação em torno do eixo y , *tumble* y , nota-se que após a abertura da válvula de admissão há uma mudança de sentido do escoamento, que é intensificada durante a admissão. Estes dois movimentos são essenciais para a homogeneização da mistura ar-combustível, e são fortemente influenciados pelo formato do pistão. Já para no *swirl* z não houve significativas amplitudes durante a

evolução do ciclo, onde a turbulência gerada na coordenada z é, principalmente, derivada da forma do coletor de admissão, e possui maior importância em motores Diesel.

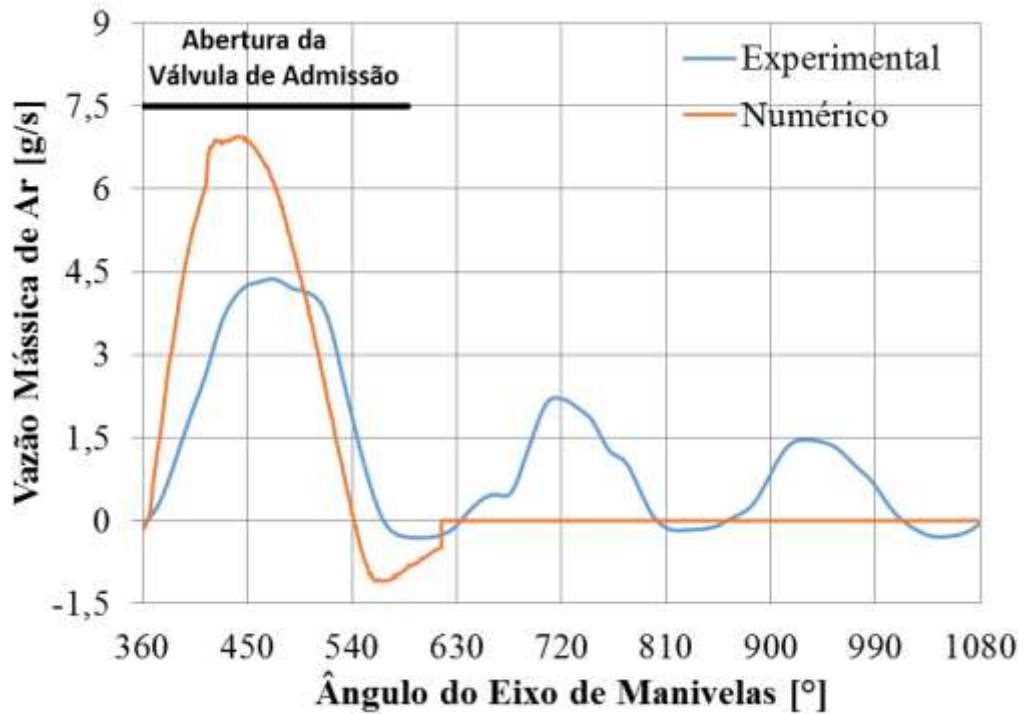


Figura 6.7 – Vazão mássica de ar na admissão.

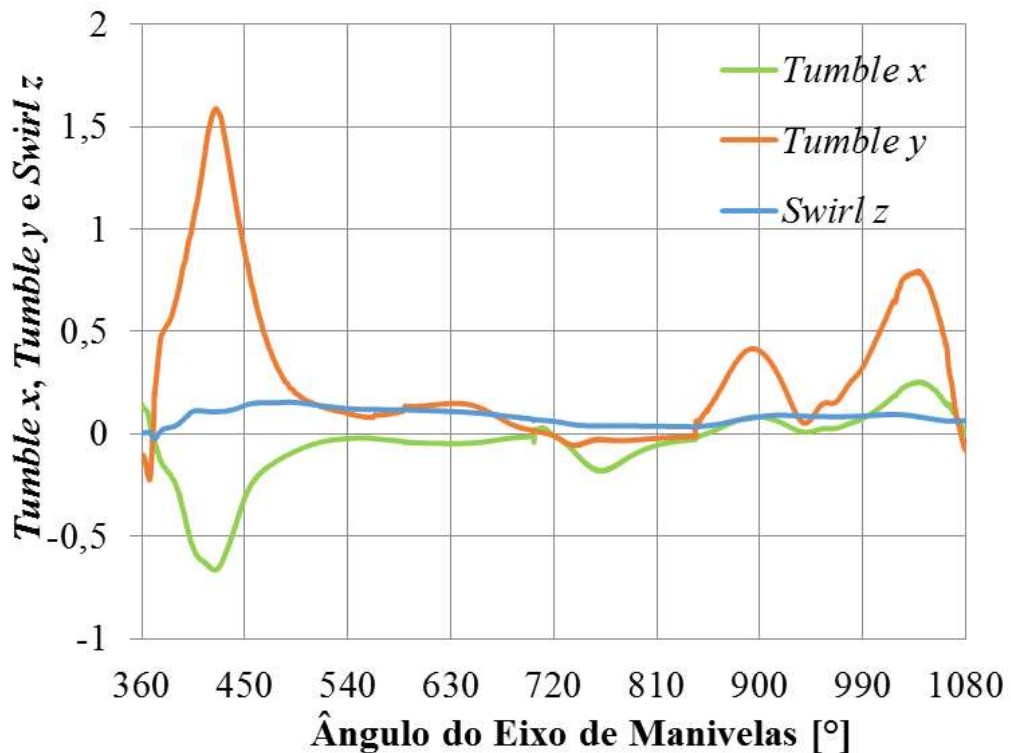


Figura 6.8 – *Tumble x*, *tumble y* e *swirl z*.

6.1.2 Campos de Pressão

Analisando o campo de pressão absoluta no corte A-A (Figura 6.9), observam-se baixos valores de pressão em torno da haste da válvula de admissão, em virtude das altas velocidades decorrentes da admissão de ar-combustível. Sobre a superfície do pistão, nota-se regiões com menores pressões, devidas ao movimento descendente do pistão, gerando abertura do volume causada pelo seu deslocamento. Após a sede da válvula ocorre uma recuperação parcial da pressão no interior do cilindro, provocada pela expansão do escoamento e, conseqüentemente, diminuição da velocidade. No canto superior esquerdo da haste da válvula admissão, gradientes de pressões estão presentes devido às recirculações geradas pela geometria da haste. As recirculações geradas pela geometria do coletor, válvula e haste influenciaram diretamente na vazão mássica de ar do motor, conforme constatado aqui, e já descrito em Heywood, 1988. No presente trabalho, quando a válvula de exaustão encontra-se fechada o coletor não é removido. A prática da remoção dos coletores nos cursos que as válvulas permanecem fechadas é muito comum para diminuir o tempo computacional, no entanto a descrições dos campos de pressão e velocidades serão prejudicadas.

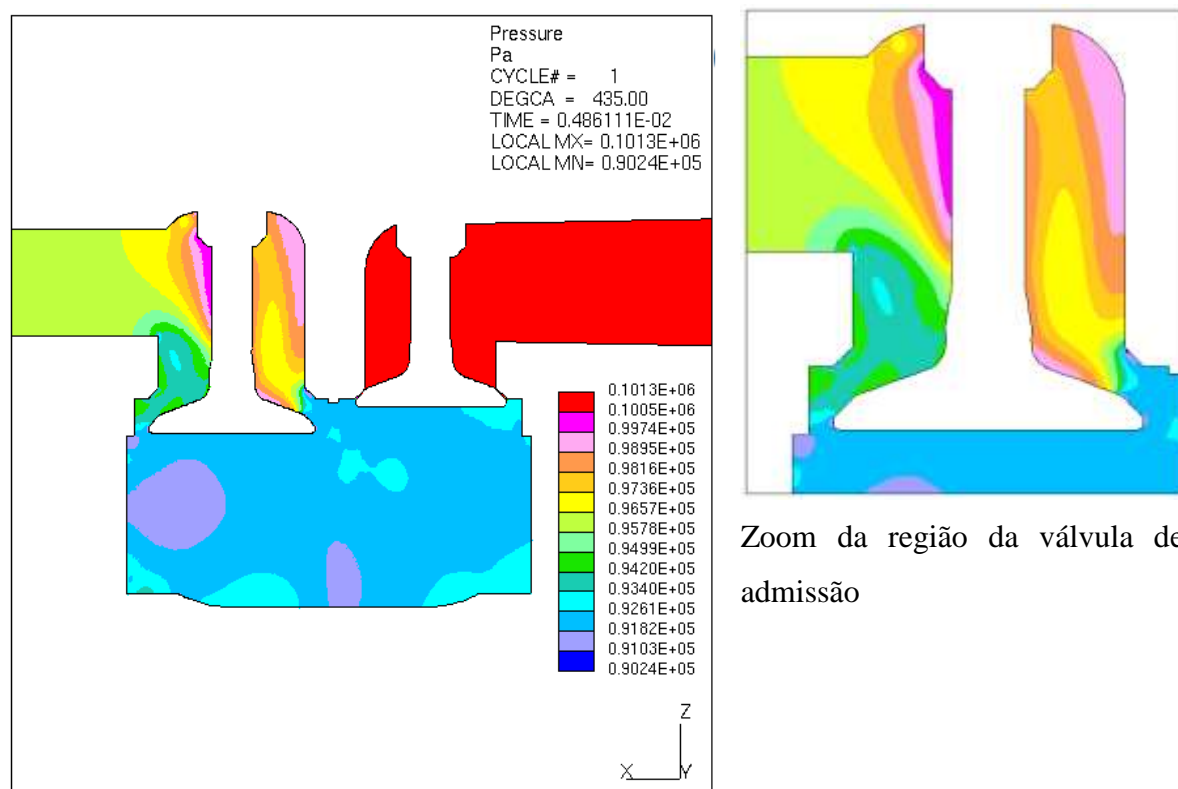


Figura 6.9 – Campo de pressão absoluta em 75° após PMS.

A Figura 6.10 (a) apresenta o campo de pressão absoluta no corte B-B, normal ao plano x , demonstrando a complexidade do escoamento pelas variações das pressões dentro do cilindro. Devido ao fato das válvulas estarem deslocadas 2,5 mm em relação ao centro do cilindro, e na direção de y , observa-se a formação de diversos gradientes de pressão, com valores inferiores à pressão atmosférica, ligeiramente acima da superfície do pistão, devido ao movimento descendente e características geométricas do pistão. Da mesma forma, regiões de maiores pressões sobre a aresta do pistão e cilindro, causadas pela redução da velocidade do escoamento. A partir da Figura 6.10 (b), pode-se observar o comportamento do campo de pressão de forma mais ampla, onde se nota que a região à esquerda do domínio possui gradientes maiores de pressão neste instante, com a vela contribuindo para a mudança.

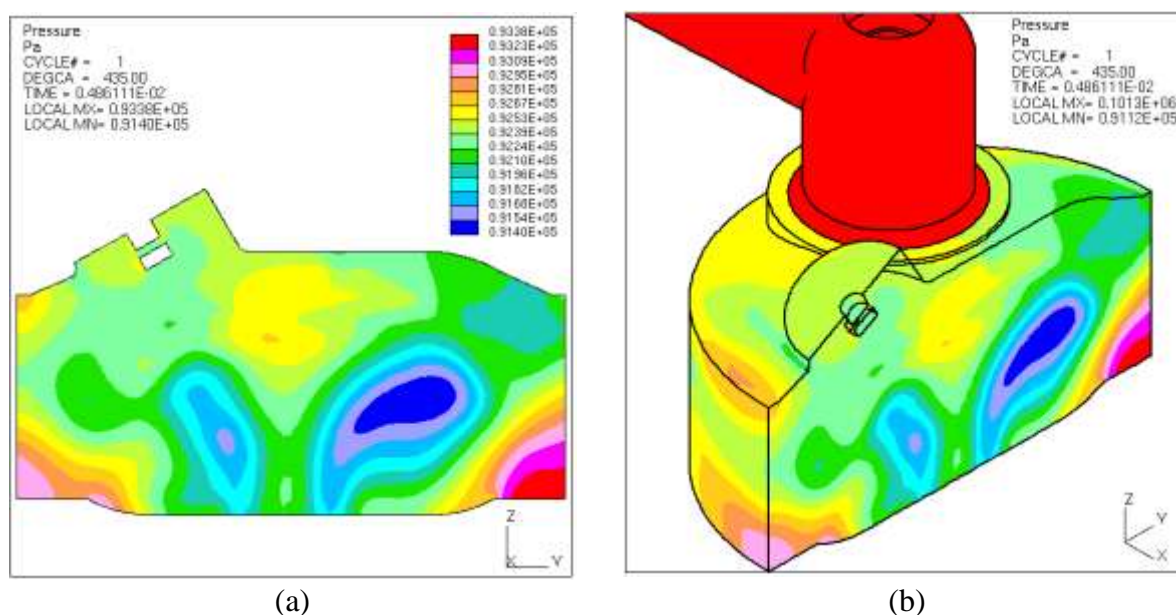


Figura 6.10 – Campo de pressão no corte B-B a 75° após PMS (a) vista normal ao plano x , (b) vista isométrica.

A comparação entre os estudos experimental e numérico da evolução da pressão absoluta no interior do cilindro é apresentada na Figura 6.11. Durante o curso de admissão, entre 360° e 540°, existe uma boa concordância entre os métodos de estudo utilizados, embora exista uma significativa diferença nos valores de vazões. Ao analisar o curso de compressão (540° a 720°), observa-se o início de uma discrepância ligeiramente acima de 702°, em função da centelha e ignição do combustível. A diferença aumenta à medida que o ciclo evolui, proveniente de maior massa admitida no estudo numérico. O pico de pressão absoluta experimental é de 16,1 MPa em 737,8°, enquanto a maior pressão absoluta no estudo

numérico é de 21,4 MPa em 737,6°. Subsequentemente, durante o curso de expansão e exaustão as pressões tendem pouco a pouco a igualarem-se.

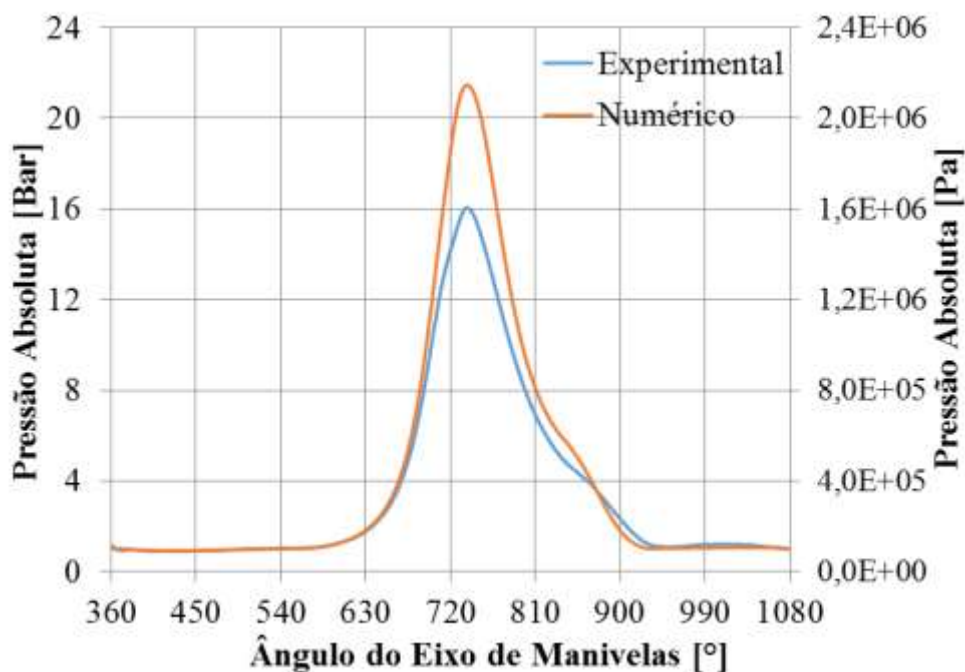


Figura 6.11 – Evolução da pressão absoluta no ciclo.

Ao considerar a aplicação em motores de combustão interna, é conveniente apresentar o comportamento da pressão em relação ao volume deslocado, isto é, o diagrama P - V apresentado na Figura 6.12. Observa-se a mesma disparidade no curso de compressão e expansão proveniente dos maiores valores de massa admitida no numérico e, como resultado, picos de pressões maiores. Nos cursos de admissão e exaustão os valores da relação P - V foram muito próximos, concordando com resultados demonstrados para evolução da pressão durante o ciclo.

O trabalho e a potência líquida indicada durante o ciclo foram determinados utilizando as Equações (B.10) e (B.11), onde o trabalho líquido exercido pelo pistão nas metodologias numérica e experimental foram de 25,84 J e 19,63 J, respectivamente. Já as potências líquidas indicadas foram de 775,35 W para o numérico e 587,43 W para o experimental, considerando a rotação média 3591 rpm. Como esperado, uma potência maior para o estudo numérico. Vale ressaltar a influência da perda de carga imposta na admissão pela MAF na potência do motor, constatando-se uma redução de aproximadamente 25 %.

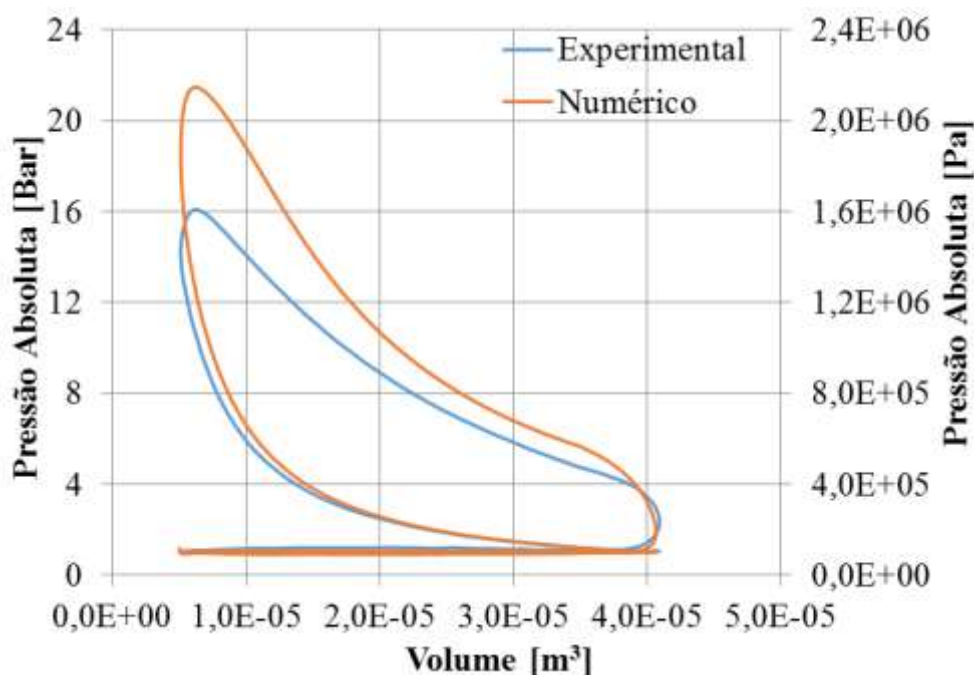


Figura 6.12 – Diagrama P-V.

6.1.3 Fração Mássica Queimada (FMQ)

Na Seção 3.6 foram apresentadas as principais características da curva da fração mássica queimada para um motor de combustão interna de ignição por centelha. A Tabela 6.1 apresenta o comparativo entre os estudos numérico e experimental da FMQ, para 10 %, 50 % e 90 % do combustível queimado no interior do cilindro, duração da queima de combustível e os coeficientes propostos pela função de Wiebe [Heywood, 1988]. Observa-se boa concordância entre os resultados comparativos dos dois estudos. Para ignição da centelha em 702° , assumindo um percentual de 1 % como sendo uma fração significativa, tem-se um atraso de ignição de aproximadamente 23° (0,001064 s) para o estudo numérico, e 24° (0,001111 s) para o estudo experimental, indicando, nestes instantes, possivelmente o surgimento e propagação da chama. Ao analisar em relação à condição de contorno do cálculo numérico, considerado o atraso de 18° , observa-se que foi necessário aproximadamente 5° para se ter uma fração de 1 % de massa de combustível queimada. A duração da combustão para o estudo numérico foi de $51,9^\circ$, enquanto que o experimental foi de $52,2^\circ$.

Na primeira metade do consumo de combustível (10 % a 50 %), obteve-se duração de $22,4^\circ$ e $23,8^\circ$ para os estudos numérico e experimental, respectivamente, e a segunda parte do processo de combustão (50 % a 90 %) aconteceu no intervalo de $29,5^\circ$ para o numérico e $28,4^\circ$ para o experimental. Logo, observa-se uma eficiência de combustão um pouco maior na

análise numérica, possivelmente devido às pressões mais elevadas durante o processo, gerando maior fração mássica queimada em relação ao experimental. Na segunda etapa (50 % a 90 %) a fração mássica queimada foi gerada um pouco mais rapidamente.

Tabela 6.1 – Fração de mássica queimada em relação ao ângulo do eixo de manivelas.

	FMQ 10 %	FMQ 50 %	FMQ 90%	Duração 10 % - 90 % (°)	<i>a</i>	<i>m</i>
Numérico	735,8°	758,2°	787,7°	51,9°	4,9	1,2
Experimental	737,9°	761,7°	790,1°	52,2°	4,7	1,4

Em relação aos coeficientes de ajuste da função de Wiebe, no estudo numérico obteve-se um valor pouco superior para o coeficiente *a*, representando menor tempo de combustão, ou seja, maior eficiência. Já para *m*, o valor diminuiu ao comparar os estudos numérico e experimental, atribuindo-se que seja em função da primeira etapa do processo de combustão, onde a massa foi rapidamente consumida e, após a primeira metade, houve um decréscimo em função da diminuição da quantidade de combustível disponível.

A Figura 6.13 apresenta a comparação entre os resultados da FMQ em relação ao ângulo do eixo de manivelas. Após a ignição em 702°, observa-se o significativo aumento da FMQ em aproximadamente 723°, associado ao início da queima de combustível. Ao evoluir no ciclo, nota-se uma diferença entre os valores de FMQ para as metodologias numérica e experimental, em conformidade com os comentários anteriores.

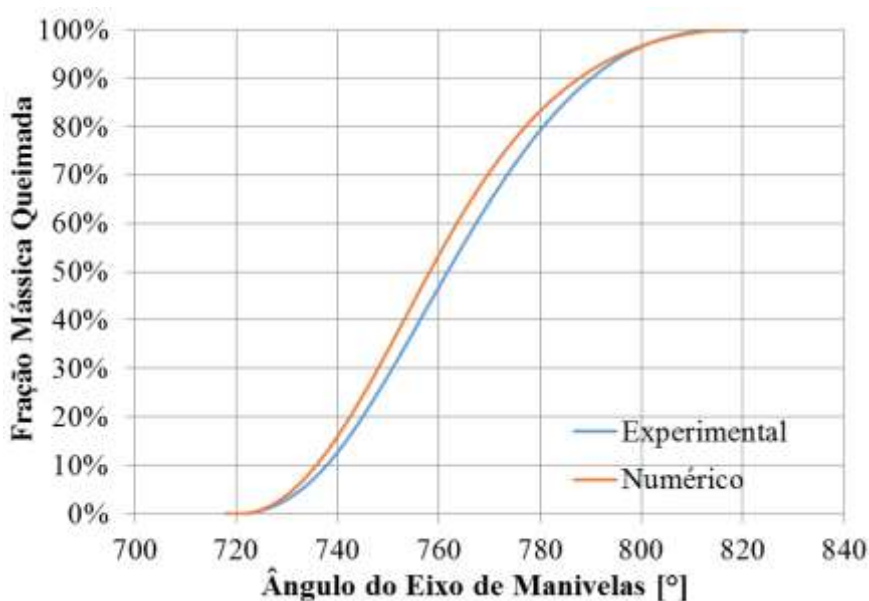


Figura 6.13 – Fração Mássica Queimada.

6.1.4 Análise dos Gases

Nesta seção é apresentado um comparativo entre os resultados numérico e experimental da análise dos gases, visando demonstrar as dificuldades ainda presentes, e o estado da arte deste tipo de modelagem. A Tabela 6.2 apresenta os resultados obtidos pelos estudos numérico e experimental. O cálculo das porcentagens em volume a partir das frações mássicas médias determinadas pela simulação numérica é demonstrado no Apêndice A. Observa-se consideráveis discrepâncias entre os dois estudos, o que não constitui-se em surpresa, segundo a revisão bibliográfica realizada. Na presente abordagem atribui-se esse fato primeiramente, de um ponto de vista teórico, à presença de uma mistura mais rica no estudo experimental, contribuindo para maior formação de emissões. A relação ar-combustível numérica aproximou-se da estequiométrica e, em comparação, pode-se notar uma maior parcela de O_2 presente na mistura, além de pouca alteração no volume de N_2 em relação ao admitido, de 72,4653 % do volume, e menor formação de CO_2 . Desse modo, possivelmente houve menor efeito de dissociação das moléculas de O_2 , N_2 e CO_2 , contribuindo para a redução da concentração de radicais livres e, conseqüentemente, menor parcela de NO e CO .

Com base nos resultados apresentados para um primeiro estudo, pode-se atribuir as diferenças entre os resultados às seguintes possíveis causas:

- Os valores da razão ar-combustível diferentes entre as metodologias;
- O modelo de Zeldovich padrão não representar corretamente a formação de NO em curto espaço de tempo, ou seja, altas rotações;
- O valor da formação de espécies na metodologia numérica é representado por um único ciclo, enquanto que para a metodologia experimental, devido à forma como é realizada a medição pelo analisador de gases, aguardando um tempo de resposta de 4 segundos a cada análise, os valores medidos das emissões são de uma sucessão de ciclos.

O desenvolvimento do estudo da formação de poluentes em motores vem sendo melhorada e, atualmente, é um desafio relacionar os resultados da modelagem numérica a resultados de instrumentos de medições de uso comercial, como é o caso do presente trabalho. Alguns autores já encontraram divergência ao comparar estes parâmetros, como Baritaud e Duclos, 1997, e Knop *et al.*, 2008. Já Reitz, 2013, apresenta um texto sobre o desafio da aplicação de CFD em motores e a importância do desenvolvimento desta ferramenta.

Tabela 6.2 – Valores das porcentagem em volume das espécies na exaustão.

Espécies	Numérico	Experimental
CO [% volume]	0,0574	0,7510
CO ₂ [% volume]	5,8846	10,7250
O ₂ [% volume]	7,1317	1,6333
NO [ppm* volume]	51,7489	239,5000
HC [ppm* volume]	-	130,6666
H ₂ O [% volume]	11,8761	-
N ₂ [% volume]	71,4323	-
H ₂ [ppm* volume]	2,1691	-
O [ppb** volume]	2,3392	-
OH [ppm* volume]	0,4570	-
CH ₄ [% volume]	3,5635	-

* parte por milhão ; ** parte por bilhão

6.2 Resultados Adicionais

Os resultados numéricos para os campos de temperatura e frações mássicas são apresentados com o objetivo de auxiliar na compreensão do complexo escoamento turbulento e reativos. Para os resultados adicionais não foram realizados comparativos entre os dados experimentais.

6.2.1 Campos de Temperatura

Os campos de temperaturas são apresentados na Figura 6.14. Observa-se que após a centelha elétrica (702°) o aumento da temperatura foi percebido devido a descarga elétrica gerada pela vela e, possivelmente, o início da queima de combustível. Em 705°, nota-se a formação de um gradiente de temperatura na forma de uma esfera e, à medida que o ciclo evoluir, o gradiente é destorcido na direção do centro do cilindro em função do movimento turbulento gerado pelo efeito de escoamento turbulento no sentido de *tumble x*. Possivelmente, a direção em que o gradiente de temperatura evolui representa a evolução da chama dentro do cilindro. Aproximadamente em 715° de eixo de manivelas, os maiores valores de temperatura, concentram-se a direita e a abaixo ao eletrodo da vela, devido a evolução da chama no escoamento.

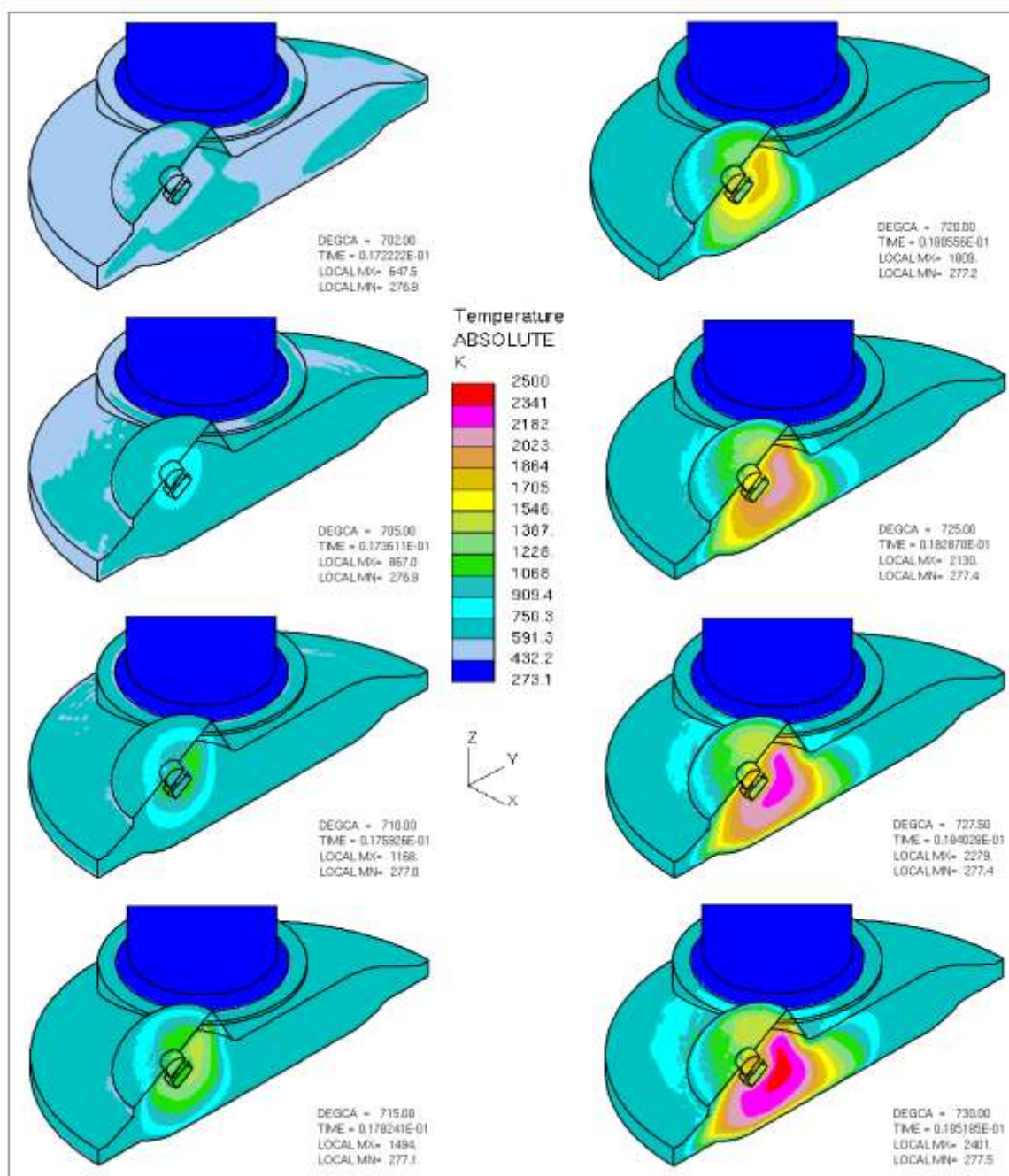


Figura 6.14 – Campos de temperatura numéricos para o corte B-B.

A Figura 6.15 apresenta os resultados numéricos para a temperatura média dentro do cilindro. Observa-se uma breve diminuição da temperatura após a abertura da válvula de admissão e, à medida que a mistura ar-combustível é admitida, a temperatura ligeiramente aumenta. Em 540° , o valor da temperatura gradativamente aumenta, em função do fechamento da válvula de admissão e início do curso de compressão. Após a ignição de centelha (702°), há um considerado aumento, e é intensificado próximo a 720° , devido ao atraso de ignição. O valor máximo de temperatura atinge 1600 K e, subsequentemente,

diminui em função da queima do combustível (visto pela curva da FMQ), expansão dos gases e abertura da válvula de exaustão (exaustão dos gases).

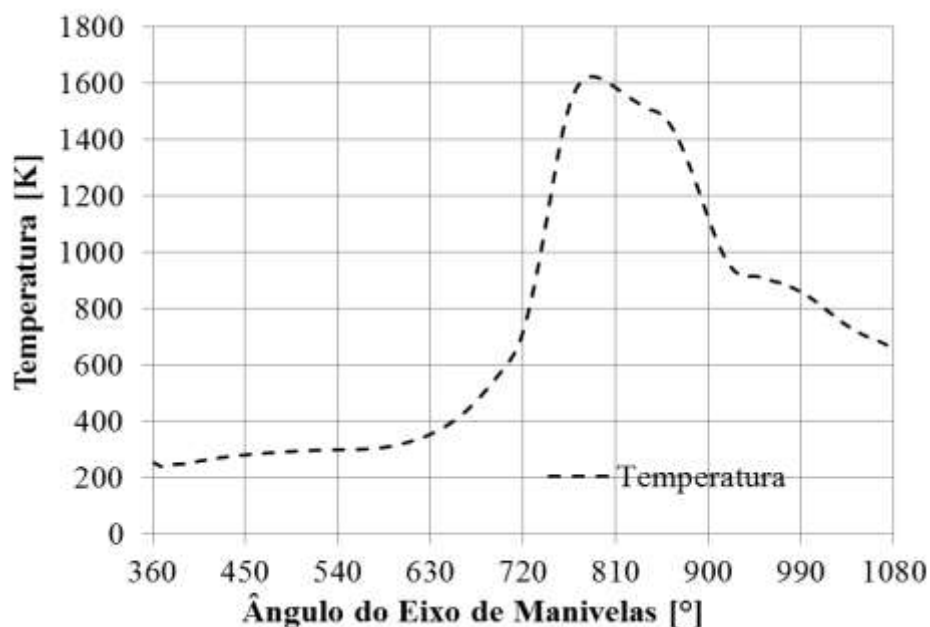


Figura 6.15 – Evolução do campos de temperatura numéricos.

6.2.2 Fração Mássica de CH₄

O comportamento da queima de metano (CH₄) após a centelha elétrica é apresentado na Figura 6.16. Observa-se que no instante da ignição a fração mássica de CH₄ (mistura ar-combustível homogênea) no interior no cilindro é de 0,055087, isto é, ϕ igual a 1. Após a centelha a formação de um *kernel* esférico ao redor da vela de ignição. À medida que o ciclo evolui o combustível é consumindo, diminuindo o valor da fração mássica de CH₄ e propagando a chama na interface entre a zona de mistura queimada e não queimada. O escoamento turbulento gera o enrugamento da chama, onde a propagação da chama é modelada e deixa de ser esférica, assume a predominância do sentido do escoamento [Boudier *et al.*, 1992 ; Candel e Poinso, 1990; Trouvé, 1992]. Após ao PMS (720°), nota-se que a chama propaga para o centro do cilindro, a fração mássica de CH₄ é menor abaixo da vela de ignição e deslocado a direita, indicando maior consumo de combustível nesta região. Esta característica está em concordância aos elevados valores de temperatura neste local.

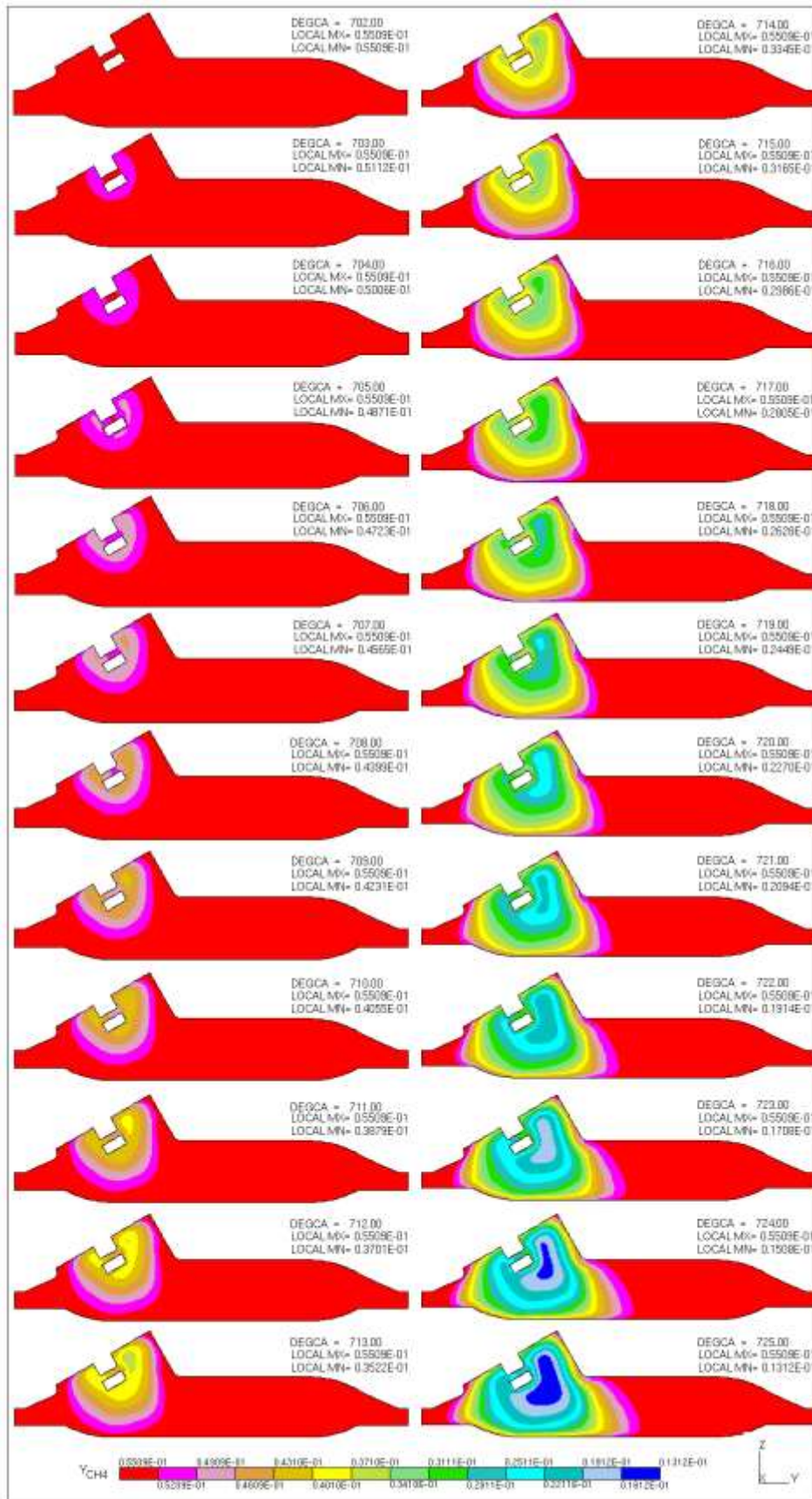


Figura 6.16 – Campos da fração mássica de CH_4 para o corte B-B.

A Figura 6.17 representa a evolução da fração mássica de CH_4 durante o ciclo. Pode-se observar que no processo de admissão a mistura ar-combustível é admitida como homogênea e, após a ignição, inicia-se o processo de combustão com a formação de uma chama. Com a propagação da chama, observa-se uma diminuição da fração mássica de CH_4 e um acentuado aumento da temperatura no interior do cilindro como resultado da queima do combustível. Após o PMI (900°), a fração mássica aumenta em função da diminuição do volume do cilindro, gerando em uma maior concentração de CH_4 .

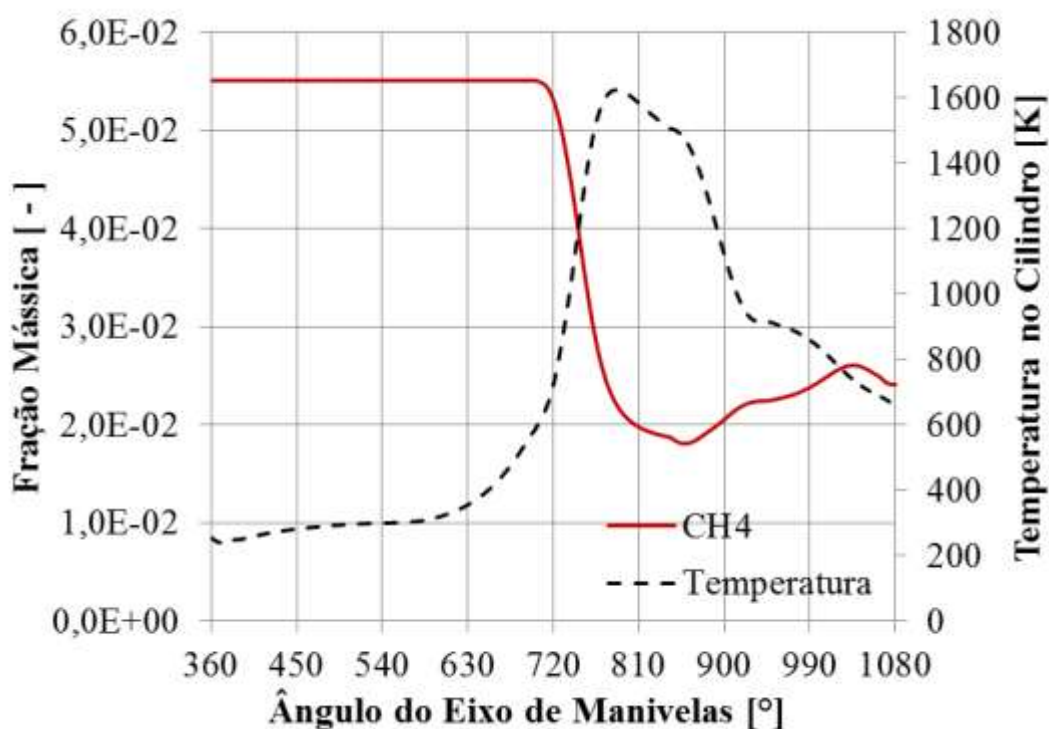


Figura 6.17 – Evolução da fração mássica de CH_4 .

7 CONCLUSÕES

A utilização de programas comerciais cresce ao passar dos anos devido aos seus códigos disponibilizarem uma aplicação geral, abrangendo um largo espectro de problemas de engenharia. Recentemente, observa-se evoluções nos programas comerciais em si, e também vinculados ao avanço dos recursos computacionais. Isto começa a viabilizar a utilização de métodos numéricos em aplicações a motores de combustão interna, considerando integralmente os seus escoamentos tridimensionais transientes, reativos e associados ao movimento de válvulas e pistão. Com base no desenvolvimento dessa modelagem, o presente trabalho apresentou uma metodologia numérica e experimental com o objetivo de comparar e validar esses estudos. Pode-se verificar que a metodologia numérica utilizada nesta avaliação obteve uma boa consistência, ao ser comparada com seus resultados experimentais, em termos do comportamento geral para a pressão interna no cilindro e vazão mássica de ar na admissão. Já os resultados da análise dos gases não apresentaram consistência na comparação entre as metodologias. Atribuindo-se, principalmente, ao instrumento de medição informar valores globais de vários ciclos e o método numérico apresentar o valor de um único ciclo. Em outras palavras, a base de tempo não é a mesma.

Os modelos de turbulência $k-\omega$ /SST e combustão ECFM-3Z foram utilizados para representar o escoamento turbulento e reativo, respectivamente. Verificou-se que a implementação do modelo numérico está correta. Os cuidados com a geração da malha, levando em conta as recomendações de tamanho de volume e refinamento, foi essencial para garantir a estabilidade do método numérico, assim como a aplicação dos modelos de turbulência e combustão. A geometria do motor, na análise numérica, foi simplificada com a remoção do volume ocupado pelo duto e pelo sensor MAF, em função da limitação computacional disponível para o estudo.

Os resultados para a vazão mássica de ar, em relação ao ângulo do eixo de manivelas, foram apresentados e discutidos. Em função da simplificação do domínio computacional, já comentada, o resultado numérico não computou a perda de pressão gerada pelo escoamento ao passar pelo duto e sensor de vazão de ar, gerando uma parcela adicional de pressão em relação ao experimental e, assim, conseqüentemente, um aumento da vazão de ar admitida no coletor de admissão. Verificou-se também que o sensor MAF não representou corretamente o escoamento no sentido contrário ao enchimento do motor.

A evolução da pressão absoluta no interior do cilindro apresentou boa concordância entre as metodologias, onde apenas houve uma significativa diferença no pico de pressão máxima devida à maior massa admitida. Os ajustes dos coeficientes de atraso para CH₄ foram corretamente representados, apresentando uma defasagem de 0,2°. A potência determinada numericamente foi 25 % superior àquela do experimento, em função de maiores vazões e pressões no estudo numérico.

Os campos médios vetoriais da velocidade e da pressão foram apresentados para a máxima velocidade do pistão em 75° após o ponto morto superior. Verificou-se regiões de recirculações causadas pela forma geométrica do duto e da válvula de admissão. Tais características contribuem para a redução do enchimento do motor. O escoamento que adentra o cilindro forma regiões de pressão com diversas magnitudes e gradientes, auxiliando na mistura ar-combustível.

A comparação entre as frações mássicas queimadas obtidas numericamente e experimentalmente apresentaram boa concordância. Pode-se ter uma estimativa do atraso do surgimento da chama e duração da combustão, verificando que o atraso no estudo experimental é ligeiramente maior. A queima de combustível calculada aconteceu numa taxa média maior na primeira metade do processo, e menor na segunda etapa, em relação à queima de combustível medida.

Para um primeiro estudo, foram comparados valores globais da análise de gases para CO, CO₂, O₂ e NO. Verificou-se uma considerável diferença entre os resultados obtidos numericamente e experimentalmente, demonstrando as dificuldades do modelamento numérico em representar a formação de espécies, assim como as limitações do instrumento de medição. Embora os resultados tenham apresentado grande discrepância nesse item, confirmou-se que instrumentos de uso comercial não são adequados ao grau de refinamento necessário para esse tipo de análise.

Por fim, pode-se declarar que, dentro das limitações computacionais e instrumentais enfrentadas, o objetivo do trabalho foi alcançado, já que chegou-se ao estado da arte na simulação de motores de combustão interna.

7.1 Propostas para Continuidade do Trabalho

Como resultado da experiência adquirida durante a execução deste trabalho, lista-se algumas sugestões de continuidade para possíveis trabalhos futuros.

- Determinar a perda de pressão no duto e sensor MAF de forma desacoplada ao escoamento tridimensional do motor, implementando-a como condição de contorno logo após, quando o sistema válvula-cilindro-pistão for abordado;
- Variar a relação ar-combustível e obter a influência da mistura no processo de combustão;
- Aprimorar as condições de contorno do problema térmico, como temperatura e resistência térmica. Esses dados normalmente são simplificados em estudos numéricos, e poderão ter importante papel em um estudo da variação destes parâmetros em relação ao processo de combustão;
- Utilizar um modelo de combustão que represente com mais acuracidade a formação de NO;
- Tornar a rotação do experimento mais estável, por exemplo com a adição de um volante, e dessa forma minimizando a variabilidade cíclica;
- Testar a modelagem da turbulência empregando LES.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Allegro Microsystems Inc. (Acesso em: fevereiro de 2012), http://www.allegromicro.com/en/Products/Part_Numbers/1101/1101.pdf.

Mariani, A., Morrone, B., Unich, A. Numerical Evaluation of Internal Combustion Spark Ignition Engines Performance Fuelled With Hydrogen-Natural Gas Blends, **International Journal of Hydrogen Energy** 37, pp 2644-2654, 2012.

Baratta, M.; Catania, A.E.; Pesce, F.C.; Spessa, E.; Rech C.; Vielmo, H.A. Multidimensional Modeling of a High Swirl-Generating Helical Intake Port for Diesel Engines, **12th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences**, Belo Horizonte - MG, Proceedings of ENCIT, Rio de Janeiro, RJ: ABCM, 2008.

Baratta, M.; Catania, A.E.; Pesce, F.C.; Spessa, E.; Rech, C.; Vielmo, H.A. Comparisons Between Steady State Analyses of a High Swirl-Generating Helical Intake Port for Diesel Engines, **12th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences**, Belo Horizonte - MG. Proceedings of ENCIT, Rio de Janeiro, RJ: ABCM, 2008a.

Balbinot, A. e Brusamarello, V. J. **Instrumentação e Fundamentos de Medidas**, v.1. Rio de Janeiro, LTC: 2006.

Baritaud, T.A., and Green, R.M. A 2-D Flame Visualisation Technique Applied to the Engine, **SAE Technical Paper Series** 860025, 1986.

Baulch, D.L., Drysdall, D.D., Horne, D.G. and Lloyd, A.C. **Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reactions**. Butterworth, 1973.

Beckwith, T. G.; Marangoni, R. D.; Leinhard, J.H. **Mechanical Measurements**, 5. ed., 1993.

Bird, R.B.; Stewart, W.E.; Lightfoot, E.N. **Fenômenos de Transporte**, 2 ed., LTC, Rio de Janeiro, 2004.

Blint, R.J., The Relationship of the Laminar Flame Width to Flame Speed, **Combust. Sci. and Tech.**, 49, pp.79-92, 1986.

Bohbot, J., Gillet, N., Benkenida, A, IFP-C3D: an Unstructured Parallel Solver for Reactive Compressible Gas Flow with Spray, **Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP**, vol 64, pp 309-335, 2009.

Boudier, P., Henriot, S., Poinso, T., and Baritaud, T., A Model for Turbulent Flame Ignition and Propagation in Spark Ignition Engines, **24th Symp. (int) on Combustion**, The Combustion Institute, pp. 503-510, 1992.

Bougrine, S., Richard, S., Veynante, D. On the Combination of Complex Chemistry with a 3-D Coherent Flame Model to Account for the Properties in Spark Ignition Engines Simulations, **Proceedings of the Combustion Institute** 33, pp 3123-3130, ELSEVIER, 2011.

Bosch, **Hot-film air-mass meter**, type HFM 2 model 0 280 218 002. (Acesso em: Fevereiro 2012) http://apps.bosch.com.au/motorsport/downloads/sensors_airmass.pdf, 2010.

Bosh Motorsport. **Lambda Sensor LSU 4.2**, Germany, 2014.

Candel, S.M. and Poinso, T.J., Flame Stretch and the Balance Equation for the Flame Area, **Combustion Sci. and Tech.**, 70, pp.1-15, 1990.

Champion, M., Deshaies, B., Joulin, G. and Kinoshita, K Spherical Flame Initiation: Theory versus Experiments for Lean Propane-Air Mixtures, **Combustion and Flames** 65, pp 319-337, 1986.

Champion, M., Deshaies, B. and Joulin, G. Relative Influences of Convective and Diffusive Transports during Spherical Flame Initiation, **Combustion and Flame** 74, pp 161-170, 1988.

Chen, C.J.; Jaw, S.Y. **Fundamentals of Turbulence Modeling**, Taylor & Francis, New York, 1998.

Colin, O. and Benkenida, A. The 3-Zone Extended Coherent Flame Model (ECFM3Z) for computing premixed/diffusion combustion, **Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP**, **59**(6), pp. 593-609, 2004.

Colin, O., Benkenida, A., Angelberger, C. 3D Modeling of Mixing, Ignition and Combustion Phenomena in Highly Stratified Gasoline Engines, **Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP**, 58, No. 1, pp. 47-62, 2003.

Combustion Pressure Sensor for OEM Applications, **AutoPSI-S specifications** (Acesso em fevereiro 2012) <http://www.optrand.com/apsis.htm>, 2012

Das, S., Houtz, P.J. and Reitz, R.D. Effect of Injection Spray Angle and Combustion Chamber on Engine Performance and Emission Characteristics of a Large Bore Diesel Engine, ICE-Vol.32-1, 1999 **Spring Techn Conf., ASME 1999**, 1999.

Duclos, J.M., Bruneaux, G. and Baritaud, A., 3D Modelling of Combustion and Pollutants in a 4-Valve SI Engine; Effect of Fuel an Residuals Distribution and Spark Location, **SAE Technical Paper Series 961964**, 1996.

Duclos, J.M. and Zolver, M. 3D Modelling of Intake, Injection and Combustion in a DI-SI Engine under Homogeneous and Stratified Operating Conditions, **The Fourth International Symposium COMODIA 98**, 1998.

Duclos, J.M., Zolver, M., Baritaud, T. 3D Modeling of Combustion for DI-SI Engines, **Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP**, Vol. 54 (1999), No. 2, pp. 259-264, 1999.

EAI – **Energy Information Administration, International Energy Annual**, web www.eia.doe.gov/eia Projections EIA, World Energy Plus (Consultado em julho de 20 de julho de 2012), 2012.

El Tahry, S.H. $k-\varepsilon$ Equation for Compressible Reciprocating Engine Flows, **AIAA Journal Energy**, 7(4), pp. 345-353, 1983.

Falcão, C.E.G.; Rech, C.; Soriano, B.S.; Wildner, F.D.; Mello, P.B., Vielmo, H.A. Experimental Measurements of Pressure Waves in Intake System of a CFR Engine, **In: ENCIT - Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering 2012**, Rio de Janeiro. Proceedings, 2012.

Ferrari, G. **Motori a Combustione Interna**, Torino, Ed il Capitello, 2005.

Ferziger, J.H.; Perić, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**, Spring, New York, 2002.

Flower, W.L., Hanson, R.K. and Kruger, C.H. Kinetics of the reaction of nitric oxide with hydrogen, **15th Symp. (Int.) on Combustion**, The Combustion Institute, 1975.

Fortuna, A.O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações**, Ed. USP, São Paulo, 2000.

Gosman, A.D. Multidimensional Modeling of Cold Flows and Turbulence in Reciprocating Engine, **SAE Technical Paper Series 850344**, 1985.

Gülder, O.L. Turbulence Premixed flame propagation models for different Combustion Regimes, **23rd Symp. (Int) on Combustion**, The Combustion Institute, pp. 743-750, 1990.

Hautman, D.J., Dryer, F.L., Schug, K.P., Glassman, I. A Multiple-Step Overall Kinetic Mechanism for the Oxidation of Hydrocarbons, **Comb. Sc. & Techn**, 25, pp. 219-235, 1981.

Heywood, J.B. **Internal Combustion Engine Fundamentals**, McGraw-Hill, New York, 1988.

Henriot, S., Bouyssounouse, D. and Baritaud, T. Port Fuel Injection and Combustion Simulation of a Racing Engine. **SAE Technical Paper Series 2003-01-1845**, 2003.

High-accuracy length gauges, **HEIDENHAIN-METRO MT25**. (Acesso em: Fevereiro 2012) https://www.valuetronics.com/Manuals/HEIDENHAIN_MT12-MT25B.pdf, 2012.

Hinze, J.O. **Turbulence**, 2nd Edition, McGraw-Hill, New York, 1975.

Hirsch, C. Numerical Computation of Internal and External Flows - Vol II: Fundamentals of Computational Fluid Dynamics, **John Wiley & Sons**, New York, 2007.

Hirschfelder, J.O., Curtiss, C.F. and Bird, R.B. **Molecular Theory of Gases and Liquids**, Wiley, New York, 1954.

HONDA (Acesso em julho de 2012) <http://engines.honda.com/models/model-detail/gx35>, 2012.

Issa, R.I.; Gosman, A. D.; Watkins, A. P. The Computation of Compressible and Incompressible Recirculating Flows by a Non-Iterative Implicit Scheme, **Journal. Comp. Phys.**, 62, pp. 66-82, 1986.

Issa, R.I. Solution of the Implicitly Discretised Fluid Flow Equations by Operator-Splitting, **Journal. Comp. Phys.**, 62, 99 40-65, 1986.

Jasak, H.; Luo, J.Y.; Kaludercic, B.; Gosman, A.D.; Echtele, H.; Liang, Z.; Wirbeleit, F.; Wierse, M.; Rips, S.; Werner, A.; Fernstr.m, G.; Karlsson, A. Rapid CFD Simulation of Internal Combustion Engines, **SAE Technical Paper Series** 1999-01-1185, 1999.

Jennings, M.J., Multidimensional Modelling of Turbulent Premixed Charge Combustion, **SAE Technical Paper Series** 920589, 1992.

Jones, W.P. **Prediction Methods for Turbulence Flow**. Hemisphere, Washington, D. C., pp. 1-45, 1980.

Jones, W. P.; Launder, B.E. The Calculation of Low-Reynolds-Number-Phenomena With a Two-Equation Model of Turbulence, **Int. J. Heat Mass Transf.**, Vol. 16, pp. 119-1130, 1973.

Kinsler, L. E. Fundamentals of Acoustics, John Wiley & Sons, 1980.

Kleemann, A.P., Menegazzi, P., Henriot, S. and Marchal, A. Numerical Study on Knock and SI Engine by Thermally Coupling Combustion Chamber and Cooling Circuit Simulations. **SAE Technical Paper Series** 2003-01-0563, 2003.

Kline, S. J., and McClintock, F. A., **Describing Uncertainties in Single Sample Experiments**, **Mech. Eng.**, 3-8, 1953.

Knop, V., Benkenida, A., Jay, S., Colin, O. Modelling of Combustion and Nitrogen Oxide Formation in Combustion Engines within a 3D CFD Code Hydrogen-Fuelled Internal, **International Journal of Hydrogen Energy** 33, pp 5083 – 5097, 2008.

Ko, Y., Arparci, V.S., Anderson, R.W. Spark Ignition of Propane-Air Mixtures Near the Minimum Ignition Energy: Part II. A Model Development, **Combustion and Flame** 83, pp 88-105, 1991.

Korakianitis, T., Namasivayam, A.M., Crookes, R.J. Natural-Gas Fueled Spark-Ignition (SI) and Compression-Ignition (CI) engine performance and emissions, **Progress in Energy and Combustion Science** 37, pp 89-112, 2011.

Kuo Tang-Wei and Reitz, R.D., Computation of Premixed-Charge Combustion in Pancake and Pent-Roof Engines, **SAE Technical Paper Series** 890670, 1989.

Labview **User Guide**, 2008.

Lakshminarayanan, P.A.; Aghav, Y. V. **Modelling Diesel Combustion**, Springer, Mechanical Engineering Series, 2010.

Launder, B.E.; Spalding, D.B. The Numerical Computation of Turbulent Flows, **Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng.**, 3, PP. 269-289, 1974.

Leschziner, M.A. Practical Evaluation of Three Finite Difference Schemes for the Computation of Steady-State Recirculating, **Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng.**, 23, pp. 293-312, 1980.

Libby, P.A. and Williams, F.A. **Turbulent Reacting Flows**, Springer Verlag, Berlin, 1980.

Lien, F.S.; Chen, W.L.; Leschziner, M. A.; **Low Reynolds Number Eddy Viscosity Modeling Based on Non-Linear Stress-Strain/Vorticity Relations**, Proceedings of Third Symposium on Engineering turbulence modeling and measurements, Crete, Greece, 1996.

Lumley, J.L. **Engines: An introduction**, Cambridge, New York, 2008.

Maliska, C.R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**, LTC, Rio de Janeiro, 2 ed., 2004.

Menter, F.R. Zonal Two Equation $k-\omega$ Turbulence Models for Aerodynamic Flows, Proc. 24th Fluid Dynamics Conf., Orlando, Florida, USA, 6-9 July, **AIAA Journal** 93-2906, 1993.

Metghalchi, M., and Keck, J.C., Burning Velocities of Mixtures of Air with Methanol, isooctane, and indolene at high pressure and temperature, **Combustion and Flame**, 48, pp. 611-629, 1982.

Monat, J.P., Hanson, R.K., and Kruger, C.H. 1979. Shock tube determination of the rate coefficient for the reaction $N_2 + O \rightarrow NO + O$, **17th Symp. (Int.) on Combustion**, The Combustion Institute, 1979.

NAPRO Eletrônica Industrial LTDA. **PC-Multigás o Analisador de Gases Compacto e Completo**, Diadema, São Paulo, 2012.

Neufeld, P.D., Janzen, A.R. and Aziz, R.A. Empirical equations to calculate 16 of the transport collision integrals $\Omega^{(l,s)*}$ for the Lennard-Jones (12-6) potential, *J. Chem. Phys.*, **35(3)**, pp. 1100-1102, 1972.

Oliveira, A. B. S.; Vianna, J. N. S.; Neves, F. J. R.; Sousa, M. T. Metrological Study on the Setting of the Top Dead Center in Internal Combustion Engines **SAE Paper 962383**, 1996.

ONUBR, População mundial deve atingir 96 bilhoes em 2050 (Acesso em Janeiro de 2014) <http://www.onu.org.br/populacao-mundial-deve-atingir-96-bilhoes-em-2050-diz-novo-relatorio-da-onu/>, 2014.

Oprand Incorporated. **AutoPSI Pressure Sensors Operating Instructions**, Plymouth, Michigan, 2014.

Patankar, S.V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**, Hemisphere, Washington, USA, 1980.

Patterson, M.A., Kong, S.C., Hampson, G.J., Reitz, R.D., Modeling the Effects of Fuel Injection Characteristics on Diesel Engine Soot and Nox Emissions, **SAE Technical Paper Series**, 940523, 1994.

Peters, N., **Turbulent Combustion**, Wiley, New York, 2000.

Pischinger, S. and Heywood, J.B. A Model for Flame Kernel Development in a Spark-Ignition Engine, **Twenty-Third Symposium on Combustion** – The Combustion Institute, pp 1033-1040, 1990.

Poinsot T., Veynante D., Candel S. **Quenching Processes and Premixed Turbulent Combustion Diagrams**, *Journal of Fluid Mechanics*, 228, 561-606, 1991.

Pope, S.B., The Evolution of Surfaces in Turbulence, **Int. J. Eng. Sci.**, 26(5), pp.445-469, 1988.

Pope S.B. Combustion Modeling Using Probability Density Function Methods, **American Institute of Aeronautics and Astronautics**, pp 349-364, 1990.

Pope, S.B. Computations of Turbulent Combustion: Progress and Challenges, **Twenty-Third Symposium on Combustion** – The Combustion Institute, pp 591-612, 1990a.

Population Division United States Census Bureau International Database, **World population: 1950e2050 on-line statistics**. Visitado em 10 de janeiro de 2014, <http://www.census.gov/ipc/www/idb/worldpopgraph.php> , 2014.

Pulkrabek, W.W. **Engineering Fundamentals of the Internal Combustion Engine**. 1. ed. Upper Saddle River, N.J.: Prentice-Hall, Inc., 1997.

Rech, C., **Análise Numérica e Experimental do Escoamento em Motores de Combustão Interna**, Porto Alegre, UFRGS, Tese de Doutorado, 2010.

Reitz, R.D. Directions in Internal Combustion Engine Research, **Combustion and Flame** 106, 1-8, 2013.

Richtmeyer, R.D.; Morton, K.W. Difference Methods for Initial-Value Problems, 2nd Edition, **Wiley-Interscience**, New York, 1967.

Rotary encoder (incremental type), **E40S-6-2048-6-L-5 manual**.(Acesso em fevereiro 2012) <http://autonics.thomasnet.com/Asset/E40S,HB,E80H%20manual.pdf>, 2012

Rung, T. **Formulierung universeller Wandrandbedingungen für Transportgleichungsturbulenzmodelle**, Institutsbericht Nr. 02/99, Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, Technische Universität Berlin, 1999.

Ryan III, T.W. and Callahan, T.J., Homogeneous Charge Compression Ignition of Diesel Fuel, **SAE Technical Paper Series**, 961160, 1996.

Schlichting, H. **Boundary-Layer Theory**. McGraw-Hill, 7^a ed, United State, 1979.

Silva Freire, A.P.; Menut, P.P. M.; Su, J. **Turbulência**, ABCM, Rio de Janeiro, vol. 1, 2002.

Star-cd Version 4.20: **Best Practices Guide for Internal Combustion Engines**, CD-adapco, 2014.

Star-cd Version 4.20: **Methodology**, CD-adapco, 2014a.

Star-cd Version 4.20: **User Guide es-ice**, CD-adapco, 2014b.

Starret Indústria e Comércio LTDA. **Relógios Comparadores Analógicos** modelo 3025, São Paulo, 2011.

Taylor, C. **Análise dos Motores de Combustão Interna**, Vol.1 e Vol.2, Edgard Blücher, São Paulo, 1988.

Tennekes, H.; Lumley, J. L. **A First Course in Turbulence**, The MIT Press, United States, 1972.

Torres, A. and Henriout, S. 3D Modeling of Combustion in Learn Burn Four-Valve Engines: Influence of Intake Configuration, **International Symposium COMODIA 94**, 1994.

Trouvé, A., The Evolution Equation for the Flame Surface Density in Turbulent Premixed Combustion, **Center for Turbulence Research**, Annual Research Briefs, Stanford University/NASA Ames, pp. 393-409, 1992.

Velghe, A., Gillet, N., Bohbot, J A, A high Efficiency Parallel Unstructured Solver Dedicated to Internal Combustion Engine, **Computers and Fluids** 45, pp 116-121, 2011.

Warnatz, J., Influence of Transport Models and Boundary Conditions on Flame Structure, *in* **Numerical Methods in Laminar Flame Propagation** (Eds. N. Peters and J. Warnatz), Friedr. Vieweg & Sohn, Wiesbaden, 1982.

Warsi, Z.V.A. Conservation Form of the Navier-Stokes Equations in General Nonsteady Coordinates, **AIAA Journal**, 19, pp. 240-242, 1981.

Weller, H.G., Uslu, S., Gosman, A.D., Maly, R.R., Herweg, R., and Heel, B., Prediction of Combustion in Homogeneous-Charge Spark-Ignition Engines, **3rd Int. Symp on Diagnostics and Modelling of Combustion in Internal Combustion Engines**, Yokohama, Japan, pp. 163-169, 1994.

Wilcox, D.C. Reassessment of the Scale-Determining Equation for Advanced Turbulence Models, **AIAA Journal**. Vol. 26, Nov., pp. 1299-1310, 1988.

Wilcox, D.C. **Turbulence Modeling for CFD**, 2nd, DCW Industries, Inc. La Cañada, California, 2000.

Wildner, F.D. **Análise Experimental da Velocidade de Combustão em Motores de Combustão Interna**, Porto Alegre, UFRGS, Tese de Doutorado, 2010.

Wilkes, N.S.; Thompson, C. P. An Evaluation of Higher-Order Upwind Differencing for Elliptic Flow Problems, **CSS 137, AERE**, Harwell, 1983.

Włodarczyk, M. T. Embedded Fiber-Optic Combustion Pressure Sensor for Automotive Engine Controls, **FISITA World Automotive Congress**, 27 de setembro a 1^o de outubro, Paris, França, 1998a.

Włodarczyk, M. T. In-Cylinder Fiber-Optic Pressure Sensor for Monitoring and Control of Diesel Engines, **SAE Future Transportation and Technology Conference**, 11 a 13 de agosto, Costa Mesa, California, E.U.A., 1998b.

Włodarczyk, M. T. Long-Life Fiber-Optic Pressure Sensors for Reciprocating Machinery Monitoring, **53rd Meeting of the Society for Machinery Failure Prevention Technology**, Virginia Beach, Virginia, E.U.A., 19 a 22 de abril de 1999b.

Wlodarczyk, M. T., Long-Life Fiber-Optic Pressure Sensors for Harsh Environment Applications, **9th Trade Fair and Conference Sensor 99**, Maio, Nuremberg, Alemanha, 1999a.

Zancanaro, F.V.Jr., **Simulação Numérica do Escoamento Turbulento em Motores de Combustão Interna**, Porto Alegre, UFRGS, Dissertação de Mestrado, 2010.

Zancanaro, F.V.Jr, Rech, C., Vielmo, H.A. Time Step Dependence in the Prediction of Flow Dynamics in an Internal Combustion Engine, **Proceedings of COBEM 2011**, 21st Brazilian Congress of Mechanical Engineering, Rio de Janeiro, RJ: ABCM, 2011.

Zellat, M., Abouri, D., Conte, T., Raghunathan, B. Advanced Modeling of GDI and DI Diesel Engines: Investigations on Combustion and High EGR Level, **15th International Multidimensional Engineer User's Meeting at the SAE Congress**, 2005.

Zhao, X., Matthews, R.D., Ellzey, J.L., Numerical Simulations of Combustion in IS Engines: Comparison of the Fractal Flame Model to the Coherent Flame Model, **International Symposium COMODIA 94**, 1994.

APÊNDICE A

A Tabela A.1 apresenta os resultados dos cálculos para porcentagem do volume de mistura dos gases de exaustão determinados na análise numérica.

Tabela A.1 – Cálculo da porcentagem de volume das espécies na exaustão

Espécies	Massa Molecular [g/mol]	Massas dos Escalares [g]	Número de Mols [mol]	Porcentagem do Volume da mistura [% vol]
CH ₄	16	1,8139E-01	1,1337E-02	3,5635E+00
O ₂	32	7,2605E-01	2,2689E-02	7,1317E+00
CO ₂	44	8,2374E-01	1,8721E-02	5,8846E+00
H ₂ O	18	6,8010E-01	3,7783E-02	1,1876E+01
N ₂	28	6,3632E+00	2,2726E-01	7,1432E+01
H ₂	2	1,3802E-05	6,9008E-06	2,1691E-03
CO	28	5,1134E-03	1,8262E-04	5,7403E-02
H	1	0,0000E+00	0,0000E+00	0,0000E+00
O	16	1,1907E-07	7,4421E-09	2,3392E-06
N	14	2,7406E-12	1,9576E-13	6,1532E-11
OH	17	2,4717E-05	1,4540E-06	4,5701E-04
NO	30	4,9387E-03	1,6462E-04	5,174489E-02
Total da Mistura		8,7796E+00	3,1814E-01	1,0000E+02

ANEXO A

A.1 Dinâmica dos Gases no Processo de Admissão

O campo de concentrações da mistura ar-combustível no interior do cilindro é um dos fatores principais para o controle da combustão em motores de combustão interna. As características iniciais do escoamento são determinadas pelo sistema de admissão, e sofrem variações durante a compressão. O campo de velocidades médio e a turbulência na câmara de combustão controlam o processo de evaporação do combustível e sua mistura com o ar. Também tem um efeito sobre os coeficientes de troca de calor com as paredes, das quais depende o grau de sollicitação térmica, a taxa de transferência de calor e concentração de poluentes emitidos para o escape. Portanto, é evidente a importância de prever estes campos, em termos de parâmetros de projeto e operação do motor [Ferrari, 2005].

Os fenômenos dinâmicos no coletor de admissão têm influência sobre a quantidade de massa admitida no cilindro. Estes fenômenos dizem respeito tanto aos aspectos fluidodinâmicos, quanto às oscilações de pressão resultantes do funcionamento das válvulas e pistão. Além disso, o comportamento do escoamento em um coletor influencia no escoamento dos demais. Considerando a vazão mássica de ar, essa influência pode ser proveitosa ou não, dependendo do regime de funcionamento do motor.

Os principais movimentos de rotação organizados do fluido na câmara de combustão são:

- O *swirl* é caracterizado por um movimento vortical cujo eixo é paralelo ao eixo do cilindro, e é derivado da componente tangencial da velocidade com que o fluido entra no cilindro;
- O *tumble* é um movimento vortical cujo eixo é perpendicular ao eixo do cilindro, e começa se formar durante o curso de admissão;
- O *squish* é um movimento radial, no plano perpendicular ao eixo do cilindro, fortemente influenciado pelo formato do pistão, já que é impulsionado pelas variações do volume entre a cabeça do pistão e o cabeçote do motor.

A.1.1 Razões de *Tumble* e *Swirl*

A intensificação do *swirl* pode ser alcançada pela inserção de obstáculos no escoamento, tais como defletor na válvula de admissão, ou encurvamento do coletor de admissão. Tais procedimentos elevam a perda de carga, mas mesmo assim são vantajosos em muitos casos. A Figura A.1 ilustra configurações de coletores e válvulas de admissão com estes artifícios. A válvula com defletor, embora seja mais utilizada em motores experimentais, apresenta a desvantagem de reduzir a área efetiva de abertura da válvula, reduzindo portanto a eficiência volumétrica [Lumley, 2008].

A razão de *swirl* z é um parâmetro adimensional que quantifica este movimento de rotação dentro do cilindro. Assume-se que a velocidade angular tenha um comportamento de movimento de rotação de corpo rígido, e assim a razão de *swirl* é obtida pela divisão da velocidade angular pela velocidade de rotação do eixo de manivelas, da seguinte forma [Heywood, 1988],

$$R_s = \frac{\omega_s}{(2\pi N)/60} \quad (\text{A.1})$$

onde R_s é a razão de *swirl*, ω_s a velocidade angular e N a rotação do motor. A sua orientação é determinada pela regra da mão direita. Existem ainda duas opções principais na obtenção da R_s : (a) em relação ao eixo central do cilindro; (b) em relação ao centro de massa do cilindro. Esta última é utilizada em situações onde a geometria do pistão não é assimétrica, como é o caso de pistão do tipo *bowl* deste trabalho.

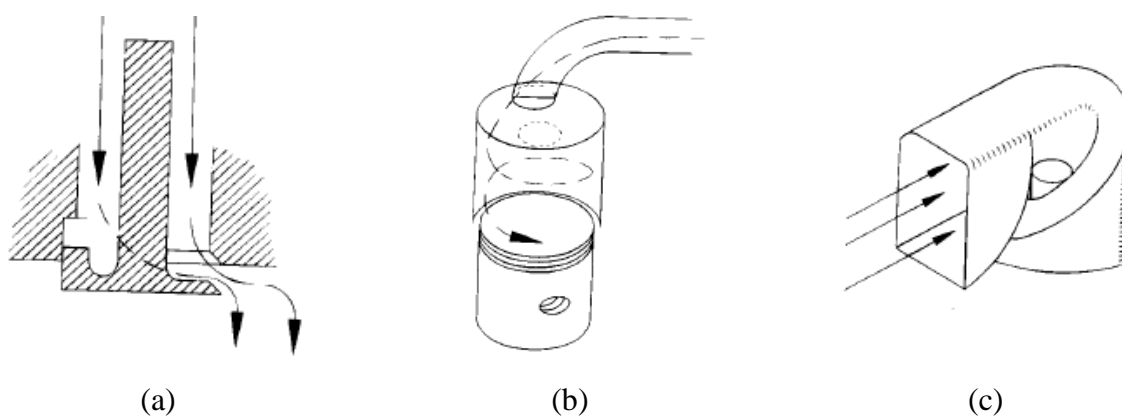


Figura A.1 - Configurações utilizadas para geradores de *swirl*: (a) válvula com defletor; (b) coletor de entrada direta; (c) coletor helicoidal [Pulkrabek, 1997].

O cálculo da razão de *swirl* pelo Star-cd é realizado em relação ao momento angular total pela velocidade de rotação, e multiplicados pelo momento de inércia do corpo rígido equivalente;

$$R_s = \frac{\sum_{células} \rho_i V_i [(X_i - X_m) v_i - (Y_i - Y_m) u_i]}{2\pi \frac{N}{60} \sum_{células} \rho_i V_i ((Y_i - Y_m)^2 + (X_i - X_m)^2)} \quad (\text{A.2})$$

onde, ρ_i é a densidade na célula i , V_i o volume da célula i , X_i , Y_i e Z_i são as coordenadas do centróide da célula i , X_m , Y_m e Z_m coordenadas do centro de massa do cilindro e u_i , v_i e w_i a velocidade do ar na célula i , nas coordenadas x , y e z , respectivamente.

Da mesma maneira que se calcula a razão de *swirl* pode-se calcular a razão de *tumble y*. Contudo este parâmetro tem rotação em torno do eixo y , isto é, no plano X - Z , paralelo ao eixo do cilindro e normal a linha entre as válvulas de admissão e de descarga.

A razão de *tumble y*, R_T , é descrita, portando, pela equação [Star-cd, 2014b],

$$R_T = \frac{\sum_{cells} \rho_i V_i [(z_i - z_m) u_i - (x_i - x_m) w_i]}{2\pi \frac{N}{60} \sum_{cells} \rho_i V_i ((x_i - x_m)^2 + (z_i - z_m)^2)} \quad (\text{A.3})$$

A razão de *tumble x*, R_{CT} , quantifica o movimento de rotação no plano Z - Y , paralelo ao eixo do cilindro e perpendicular à linha entre as válvulas de admissão e de descarga. A razão de *tumble x* é descrita pela equação [Star-cd, 2014b].

$$R_{CT} = \frac{\sum_{cells} \rho_i V_i [(y_i - y_m) w_i - (z_i - z_m) v_i]}{2\pi \frac{N}{60} \sum_{cells} \rho_i V_i ((y_i - y_m)^2 + (z_i - z_m)^2)} \quad (\text{A.4})$$

ANEXO B

Boa parte dos projetos de motores está interessada em valores médios dentro do cilindro ou em seus coletores. O Star-cd/*es-ice* possui uma grande opção de valores que podem ser monitorados, como: volume, pressão, velocidade, temperatura, densidade, calor específico, entre outros. Portanto, as formulações estão descritas nas expressões abaixo [Star-cd, 2014b].

Pressão média na região de interesse

$$\bar{p} = \frac{\sum_{\text{células}} p_i V_i}{\sum_{\text{células}} V_i} \quad (\text{B.1})$$

Temperatura média na região de interesse

$$\bar{T} = \frac{\sum_{\text{células}} \rho_i V_i T_i}{\sum_{\text{células}} \rho_i V_i} \quad (\text{B.2})$$

Densidade média na região de interesse

$$\bar{\rho} = \frac{\sum_{\text{células}} \rho_i V_i \rho_i}{\sum_{\text{células}} \rho_i V_i} \quad (\text{B.3})$$

Calor específico médio na região de interesse

$$\bar{C}_p = \frac{\sum_{\text{células}} \rho_i V_i C_{pi}}{\sum_{\text{células}} \rho_i V_i} \quad (\text{B.4})$$

Energia cinética turbulenta média na região de interesse

$$\bar{k} = \frac{\sum_{\text{células}} \rho_i V_i k_i}{\sum_{\text{células}} \rho_i V_i} \quad (\text{B.5})$$

Dissipação da energia cinética turbulenta média na região de interesse

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\sum_{\text{células}} \rho_i V_i \varepsilon_i}{\sum_{\text{células}} \rho_i V_i} \quad (\text{B.6})$$

Intensidade turbulenta média na região de interesse

$$\bar{I} = \frac{\sum_{\text{células}} \rho_i V_i \left(\frac{2}{3} k_i \right)^{0.5}}{\sum_{\text{células}} \rho_i V_i} \quad (\text{B.7})$$

Escala de comprimento da turbulência média na região de interesse

$$\bar{l} = \frac{\sum_{\text{células}} \rho_i V_i 0,09^{0,75} \frac{k_i^{1,5}}{\varepsilon_i}}{\sum_{\text{células}} \rho_i V_i} \quad (\text{B.8})$$

Massa dos escalares

$$M_k = \sum_{\text{Células}} \rho_i V_i [k_i] \quad (\text{B.9})$$


Trabalho líquido indicado por ciclo

$$W_N = \int P dv \quad (\text{B.10})$$

Potência líquida indicado

$$N_N = \frac{(W_N) \cdot (RPM) \cdot 6}{(\text{Intervalo de ângulo})} \quad (\text{B.11})$$

ANEXO C

 NAPRO ELETRÔNICA INDUSTRIAL LTDA	RELATÓRIO DE ANÁLISE PC-MULTIGAS		7.5.1	RQN-41-03
				01/01

IDENTIFICAÇÃO

Cliente: FUNDAÇÃO REGIONAL INTEGRADA FURI
 Equipamento: PC-Multigás Hardlock: M17513
 Número de Série: 14A2614 P.E.F.: 0,491
 Número de Série Banco Ótico: 84198 Versão: 11-70

VERIFICAÇÃO VISUAL - Montagem

<input checked="" type="checkbox"/> OK	Mangueiras internas e externas e corpo de filtro	Selo INMETRO	11.746.136-2
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Conectores terminais e fixação		D5725288-0
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Fusível existência e valor (3A)		Lacre
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Número de série, dados e colocação		D5725289-2
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Montagem externa, fixação tampas, espigões, porta fusível e policarbonato		

ACESSÓRIOS

<input checked="" type="checkbox"/> OK	Sonda de captação de gás completa	<input checked="" type="checkbox"/> OK	Certificado de garantia	<input checked="" type="checkbox"/>	Interf. IM/USB nº: _____
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Mangueira de purga	<input checked="" type="checkbox"/>	Adaptador DB25/DB09	<input checked="" type="checkbox"/>	Cabo USB 2.0
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Cabo de alimentação jacaré	<input checked="" type="checkbox"/>	Sonda de Temperatura <u>5331</u>	<input checked="" type="checkbox"/>	Cabo Desumidificador
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Fonte de Alimentação	<input checked="" type="checkbox"/>	Cabo RPM	<input checked="" type="checkbox"/>	
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Cabo Comunicação serial	<input checked="" type="checkbox"/>	Rhotophon com cabo	<input checked="" type="checkbox"/>	
<input checked="" type="checkbox"/>	CD Rom de Instalação	<input checked="" type="checkbox"/>	Decibelímetro com acessórios	<input checked="" type="checkbox"/>	
<input checked="" type="checkbox"/>	Manual de Operação	<input checked="" type="checkbox"/>	Anemômetro com acessórios	<input checked="" type="checkbox"/>	
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Mangueira para vedação da sonda	<input checked="" type="checkbox"/>	Cabo AVL	<input checked="" type="checkbox"/>	

TESTES

<input checked="" type="checkbox"/> OK	Estanqueidade	Valor de Vácuo: <u>250</u> mmHg		
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Calibração com gás padrão		<input checked="" type="checkbox"/> OK	med. Instantânea
	CO: <u>3,55</u>	Padrão CO: <u>3,55</u>	CO: <u>3,57</u>	temp. ambiente: <u>25</u> °C
	CO ₂ : <u>5,98</u>	CO ₂ : <u>5,98</u>	CO ₂ : <u>6</u>	temp. à 80°C: <u>80</u> °C
	HC: <u>798</u>	HC: <u>798</u>	HC: <u>798</u>	
	NOx: <u>886</u>	NOx: <u>886</u>	O ₂ : <u>0,1</u>	
			NOx: <u>886</u>	
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Acionamento da válvula zero			
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Vazão das bombas	LPM <u>3,5</u>	valor padrão	1000 RPM 3000 RPM
<input checked="" type="checkbox"/> OK	Tempo resposta do equipamento	<u>4</u> segundos	valor medido	<u>1000 RPM</u> <u>3000 RPM</u>

OBSERVAÇÃO AO CLIENTE

Este Relatório de Análise, assegura o perfeito funcionamento do seu equipamento.

Devido ao Analisador de Gases ter um método de calibração relativa onde é necessário um gás para o ponto zero e outro de span para o final de escala e também sua indicação ser dependente de fatores de temperatura ambiente e pressão, somando-se a isso a sensibilidade do Banco Ótico infravermelho vibrações e transporte a NAPRO NÃO pode garantir a calibração fora de seu laboratório para efeitos de Verificação Inicial ou Periódica junto ao INMETRO / IPEM, ou seja quando já instalados no Cliente.

Recomendamos aos Clientes adquirirem seus próprios gases de calibração como é feito no Estados Unidos e Europa para uma perfeita calibração semelhante a de fábrica.

RESPONSÁVEIS

Produção: FERNANDO REGIS FLORES Data: 23/01/2014
 Expedição: WELSON Data: 29/01/14

Figura C.1 – Calibração do analisador de gases.