



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA

METODOLOGIA NUMÉRICA PARA ANÁLISE E
CARACTERIZAÇÃO DO SPRAY DE COMBUSTÍVEL E DA
COMBUSTÃO EM UM MOTOR DE COMBUSTÃO INTERNA
COM INJEÇÃO DIRETA

HELDER ALVES DE ALMEIDA JUNIOR

Belo Horizonte 02 de Outubro de 2019

HELDER ALVES DE ALMEIDA JUNIOR

**METODOLOGIA NUMÉRICA PARA ANÁLISE E
CARACTERIZAÇÃO DO SPRAY DE COMBUSTÍVEL E DA
COMBUSTÃO EM UM MOTOR DE COMBUSTÃO INTERNA
COM INJEÇÃO DIRETA**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Área de concentração: Energia e Sustentabilidade

Orientador: Prof. Dr. Ramón Molina Valle

Universidade Federal de Minas Gerais

Belo Horizonte

A447m	<p>Almeida Junior, Helder Alves de.</p> <p>Metodologia numérica para análise e caracterização do spray de combustível e da combustão em um motor de combustão interna com injeção direta [recurso eletrônico] / Helder Alves de Almeida Junior . - 2019.</p>
Gerais,	<p>1 recurso online (139 f. : il., color.) : pdf.</p> <p>Orientador: Ramón Molina Valle.</p> <p>Tese (doutorado) - Universidade Federal de Minas Gerais, Escola de Engenharia.</p> <p>Apêndices: f. 134-139.</p> <p>Bibliografia: f. 124-133.</p> <p>Exigências do sistema: Adobe Acrobat Reader.</p> <p>1. Engenharia mecânica - Teses. 2. Dinâmica dos fluidos computacional - Teses. 3. Motores de combustão interna - Teses. 4. Atomização - Teses. I. Valle, Ramón Molina. II. Universidade Federal de Minas Gerais. Escola de Engenharia. III. Título.</p>
CDU: 621(043)	



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA

Av. Antônio Carlos, 6627 - Campus Universitário
31270-901 - Belo Horizonte - MG
Tel.: +55 31 3409.5145
E-mail: cpgmec@demec.ufmg.br

**"METODOLOGIA NUMÉRICA PARA ANÁLISE E
CARACTERIZAÇÃO DO SPRAY DE COMBUSTÍVEL E DA
COMBUSTÃO EM UM MOTOR DE COMBUSTÃO INTERNA COM
INJEÇÃO DIRETA"**

HÉLDER ALVES DE ALMEIDA JÚNIOR

Tese submetida à Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Minas Gerais, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de "**Doutor em Engenharia Mecânica**", na área de concentração de "**Energia e Sustentabilidade**".

Tese aprovada no dia 02 de outubro de 2019.

Por:

Prof. Ramon Molina Valle
Orientador - Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG

Prof. Rudolf Huebner
Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG

Prof. Cristiana Brasil Maia
Departamento de Engenharia Mecânica/ IPUC/PUC-MG

Prof. Marcio Expedito Guzzo
Departamento de Engenharia Mecânica/ CEFET-MG

Prof. Alex de Oliveira
Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais/ PUC-MG

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus pelo apoio, incentivo e pela constante presença. À Nossa Senhora e São José pelas inúmeras intercessões junto ao seu Filho para que este trabalho pudesse ser concluído de maneira honrosa.

Ao professor Ramon Molina Valle, pela orientação, incentivo, paciência e pelos constantes e transcendentos ensinamentos transmitidos.

À Graziella Giostri, esposa e amiga, que foi fundamental para que o desejo de se tornar doutor pudesse sair do sonho e se tornar realidade, meu sincero e eterno muito obrigado! Essa conquista também é sua.

Ao filho Sebastian Aronne peço desculpas pela ausência, mas saiba que você foi e é um dos meus maiores educadores. Te amo!

À Antonella Maria da Luz por tornar meus dias mais esperançosos e repleto de amor. Você ainda não nasceu, mas o papai já te ama muito!

Aos meus queridos pais Mirani e Hélder, meu amado irmão Henrique (e família) e a minha adorável avó Wilde (*in memoriam*), por esta família que sempre me apoiou e não mediu esforços nem orações para o meu sucesso.

A todos os professores, amigos e colegas do CTM, Centro de Tecnologia da Mobilidade, e da UFMG que através de parcerias, incentivos, experiências e trabalhos contribuíram para que esta tese ficasse mais enriquecida e completa. Não poderia deixar de agradecer de forma especial ao Carlos Castilla, Márcio Guzzo, Leonardo Fonseca, Vinícius Roso, Oscar Sandoval, Brayan, Claudio Santana, Alysson e Roberto.

Ao colega, e agora doutor, Mateus Dias Ribeiro por não ter medido esforços, tempo, distância e paciência. Sua colaboração foi de imensa relevância para a elaboração deste trabalho.

À Marina, secretária do departamento de Pós-graduação em engenharia Mecânica.

Agradeço especialmente ao CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, pelo suporte financeiro empregado neste trabalho com o intuito de desenvolver e aplicar os conhecimentos aqui gerados.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Meu sincero e eterno, muito obrigado!

RESUMO

A simulação computacional para a caracterização do *spray* e da combustão de um motor de combustão interna representa um grande desafio perante as novas tecnologias e sistemas que buscam um melhor aproveitamento do combustível e um menor nível de emissões. Com a crescente inserção da injeção direta no mercado automobilístico, a caracterização do *spray* de combustível é importante para aumentar a eficiência da combustão e evitar a combustão anormal. No entanto, a caracterização do *spray* e da combustão não são tarefas fáceis, tanto do ponto de vista experimental como numérico. Dentro deste contexto, este trabalho tem como objetivo principal desenvolver e aplicar uma metodologia numérica para a caracterização do *spray* e da combustão em um motor de combustão interna de injeção direta de combustível. Atendendo interesses acadêmicos e industriais na manipulação de códigos CFD, *Computational Fluid Dynamics*, abertos, é utilizado neste trabalho o programa OpenFOAM, cujo código-fonte está disponível gratuitamente para implementação. Os modelos de dispersão de *spray* como LISA, TAB, Reitz-Diwakar e KHRT foram utilizados e modificados para fazer convergir com os dados obtidos experimentalmente. Desta forma, o confronto dos resultados experimentais com os resultados dos novos modelos propostos neste trabalho garante confiabilidade aos modelos utilizados. Parâmetros importantes do *spray*, tais como comprimento de *break-up*, ângulo de cone, penetração, diâmetro de gotas, dispersão de gotas, campos de velocidade, entre outras, são calculados segundo os modelos concebidos neste trabalho. Na caracterização da combustão foram implementados novos modelos matemáticos no OpenFOAM que são capazes de reproduzir a velocidade de chama laminar, a massa específica e a temperatura média do gás queimado e não queimado, a temperatura de combustão, assim como os parâmetros que caracterizam as flutuações de turbulência e a própria turbulência. Para a caracterização da primeira quebra do *spray* foi criado um modelo matemático e os resultados obtidos mostram boa concordância com dados experimentais e da literatura. O modelo de colisão utilizado é uma forma modificada do modelo de O'Rourke, no qual em vez de apenas coletar os pacotes que estão na mesma célula, o novo algoritmo calcula a trajetória de todos os pacotes e colide com aqueles que se cruzam no mesmo intervalo de tempo, obtendo-se resultados coerentes.

Palavras-chave: CFD; OpenFOAM; Modelagem; Spray; Atomização; Combustão; Injeção Direta

ABSTRACT

The computer simulation for *spray* and combustion of an internal combustion engine represents a major challenge as new technologies and systems that seek reduction of fuel consumption and lower emissions. New technologies such as a centimeter-ignited direct fuel pump have suffered from fuel and source support from fossil energy sources, which produce increasingly efficient and less polluting roles. With the help of technology in the automotive market, fuel *spray* characterization by the injector is important to increase combustion efficiency and leave abnormal combustion. However, characterizing *spray* and combustion is not an easy task, both experimentally and numerically. This content, is found in Portuguese the *spray* and the fuel of internal fuel injection in the fuel of internal fuel. Given the academic and business interest in the open CFD cipher, OpenFOAM software is found in this work, my source code is freely available for implementation. *Spray* dispersion models such as LISA, TAB, Reitz-Diwakar and KHRT, which are already available in OpenFOAM, are used and modified to make the dynamometer test experiment data converge and the results are compared to the proposed new models. Important *spray* parameters, break angle, cone angle, penetration, drop diameter, drop dispersion, velocity fields, among others, are calculated according to the newly designed models. The characterization of combustion is generated by new mathematical forms that can typify a laminar flame velocity, a demand and an average combustion, as well as the parameters that characterize as turbulence fluctuations and turbulence itself. The results show that in the characterization of the second *spray* break, the graphs were analyzed and compared with the experimental and literature data. The elaborate collision model was a modified form of O'Rourke's model, which is not only once, but the collections are in the same cell, the new algorithm calculates the trajectory of all packets and collides with those that intersect. in the same time frame. The laminar flame results show that the combustion and pressure rates are not increased, which is a speed for doubling and an important insulation temperature in half. The results further show that the mean and temperature of the cylinder are influenced by differences in combustion temperatures. However, the combustion temperature has little effect on Reynolds average progress.

Key Words: CFD; *OpenFOAM*; Modeling; *Spray*; Atomization; Combustion

NOMENCLATURA

Letras Latinas		Unidades
A_i	Área da abertura do bico do injetor	[m ²]
B_D	Constante	
C_d	Coefficiente de descarga	
CFM	Modelo de chama coerente (<i>coherent flame model</i>)	
CTC	Cctcombustão em tempo característico	
\bar{c}	Média da variável de progresso de reação química	
D	Diâmetro das gotículas	[m]
FSC	Fechamento da velocidade da chama (<i>flame speed closure</i>)	[m/s]
k	Número de onda	
m	Massa total de combustível injetado	[kg]
\dot{m}	Vazão mássica	[kg/s]
mph	Milhas por hora	[m/h]
q	Fator	
Re	Número de Reynolds	
t	Tempo	[s]
T	Número de Taylor	
U	Velocidade	[m/s]
ν_f	Viscosidade cinemática do combustível	[m ² /s]
N_p	Número de parcelas	
We	Número de Weber	
p_a	Pressão do ar ambiente	[Pa]
p_{inj}	Pressão de injeção	[Pa]
r_m	Raio de gotícula	[m]
w	Velocidade de injeção	[m/s]
Letras gregas		Unidades
ρ	Massa Específica	[kg/m ³]
ρ_f	Massa específica do combustível injetado	[kg/m ³]

σ	Tensão superficial do combustível	[N/m ²]
θ	Ângulo de injeção	[°]
ω	Taxa de crescimento	
ω_{KH}	Taxa de crescimento máxima	[m/s]
Λ_{KH}	Comprimento de onda	[m]

Siglas

APT	<i>Aerodynamically Progressed Taylor Analogy Breakup</i>
BML	Bray-Moss-Libby
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CTM	Centro de Tecnologia da Mobilidade
EDP	Equação Diferencial Parcial
GDI	<i>Gasoline Direct Injection</i>
IAD	Índice antidetonante
KH	Kelvin-Helmholtz
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
LISA	<i>Linearized Instability Sheet Atomization</i>
MCI	Motor de Combustão Interna
OpenFOAM	<i>Open Field Operation and Manipulation</i>
PDF	<i>Probability density function</i>
PFI	<i>Port Fuel Injection</i>
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations</i>
RHS	<i>right hand side</i> – lado direito
RT	<i>Rayleigh-Taylor</i>
SCFI	<i>Straticharge Continuous Fuel Injection</i>
SMD	Diâmetro médio de Sauter
SCV	Válvula de controle de vórtice
TAB	<i>Taylor Analogue Breakup</i>
UBTE	Ultrabaixo teor de enxofre

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2.1 - O Mapa de Controle de um Mitsubishi GDI.....	20
FIGURA 2.2 – Configuração da câmara de combustão do ToyotaGDI.....	20
FIGURA 2.3 – Estratégias orientadoras de atomização.....	22
FIGURA 2.4 – Representação do Sistema de InjeçãoDireta.....	24
FIGURA 2.5 – Esquema de um spray mostrando a penetração, o ângulo de cone, e as desintegrações primária e secundária.....	26
FIGURA 3.1 - Características do Motor Monocilíndrico.....	95
FIGURA 3.2 - Vista em corte do cabeçote e do cilindro do motor monocilíndrico AVL 5496.....	95
FIGURA 3.3 - Geometria do Injetor.....	96
FIGURA 3.4 - Domínio Numérico do spray.....	102
FIGURA 4.1 - Penetração de spray por tempo, comparação de modelos com dados experimentais.....	105
FIGURA 4.2 - Diâmetro das gotículas nas parcelas do spray (Rosin-Rammler, $q=2$).....	106
FIGURA 4.3 - Diâmetro da Gotícula nas parcelas do <i>Spray</i> (Rosin-Rammler, $q=2$).....	107
FIGURA 4.4 - Diâmetro da Gotícula nas parcelas do <i>Spray</i> (Rosin-Rammler, $q=3$).....	107
FIGURA 4.5 - Diâmetro da Gotícula nas parcelas do <i>Spray</i> (Função Exponencial).....	108
FIGURA 4.6 - Diâmetro da Gotícula nas parcelas do <i>Spray</i> (modelo desenvolvido pelo autor).....	108
FIGURA 4.7 - Penetração por tempo, com colisão nos modelos Reitz-Diwakar, KHRT e no novo modelo desenvolvido.....	109
FIGURA 4.8 - Penetração por tempo, com colisão nos modelos Reitz-Diwakar, KHRT e no novo modelo desenvolvido.....	110
FIGURA 4.9 - SMD em função dp tempo, nos modelos Reitz-Diwakar, KHRT e no novo modelo.....	111

FIGURA 4.10 - Velocidade Relativa em função do tempo, nos modelos Reitz-Diwakar, KHRT e novo modelo.....112

LISTA DE GRÁFICOS

GRÁFICO 3.1 – Impacto da alteração da malha na variável de progresso médio de reação.....	99
GRÁFICO 3.2 – Impacto da alteração da malha na pressão média do cilindro.....	100
GRÁFICO 3.3 - Penetração por tempo, comparando com a literatura.....	103

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Características do Motor Monocilíndrico.....	95
Tabela 3.2 – Características do Injetor spray G da Delphi.....	96
Tabela 3.3 – Condições de Simulação.....	98
Tabela 3.4 – Número de células, volume e comprimento característico da câmara de combustão.....	100
Tabela 3.5 – Condições Iniciais.....	102

SUMÁRIO

AGRADECIMENTOS	4
RESUMO	6
NOMENCLATURA	8
SIGLAS	9
LISTA DE FIGURAS	10
LISTA DE GRÁFICOS	12
LISTA DE TABELAS	13
1. INTRODUÇÃO	17
1.1 Objetivos.....	18
1.2 Organização do documento.....	18
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	20
2.1 INTRODUÇÃO.....	20
2.2 FUNDAMENTOS BÁSICOS.....	20
2.2.1 Sistema de Injeção Direta.....	20
2.2.2 Parâmetros Associados aos Sprays gerados pela Injeção Direta de combustível 28	
2.2.3 Combustíveis.....	33
2.2.4 Dinâmica dos Fluidos Computacional.....	34
2.2.5 Códigos Computacionais de CFD.....	37
2.3 FUNDAMENTOS DO OPENFOAM.....	38
2.3.1 Modelos da Injeção e da Quebra Primária.....	38
2.3.2 Modelos da Quebra Secundária.....	50
2.3.3 Modelos de Colisão.....	60
2.3.4 Modelo de Trajetória.....	62
2.3.5 Modelo de Evaporação.....	63
2.3.6 Modelos de Turbulência.....	65
2.4 EVOLUÇÃO CFD EM MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA.....	66

2.5	MODELAGEM CFD DA COMBUSTÃO EM MOTORES COM INJEÇÃO DIRETA.....	70
2.6	ESTADO DA ARTE	72
2.7	CONSIDERAÇÕES FINAIS DA REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	77
3.	METODOLOGIA.....	80
3.1	INFRAESTRUTURA COMPUTACIONAL.....	82
3.2	DOMÍNIO COMPUTACIONAL E GERAÇÃO DA MALHA.....	82
3.3	MODELOS MATEMÁTICOS PARA CARACTERIZAÇÃO DO SPRAY E DA COMBUSTÃO.....	82
3.3.1	Modelo Utilizado para a Primeira Quebra.....	83
3.3.2	Modelo Utilizado para a Segunda Quebra.....	88
3.3.3	Modelo Utilizado para a Evaporação do Combustível.....	89
3.3.4	Modelo Utilizado para a Penetração.....	89
3.3.5	Modelo Utilizado para a Dispersão das Gotas	89
3.3.6	Modelo Utilizado para a Colisão das Gotas	90
3.3.7	Modelo Utilizado para definir a Trajetória das Gotas.....	92
3.3.8	Modelo Utilizado para Conservação da Massa	92
3.3.9	Modelo Utilizado para Conservação da Quantidade de Movimento.....	93
3.3.10	Modelo Utilizado para Conservação da Quantidade de Energia.....	93
3.3.11	Modelo Utilizado para a Combustão.....	94
3.4	GEOMETRIA DO MOTOR	97
3.5	CARACTERIZAÇÃO DO INJETOR.....	99
3.6	IMPLEMENTAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO	100
3.7	MODELO DE IGNIÇÃO UTILIZADO	101
3.8	ANÁLISE DE INDEPENDÊNCIA DA MALHA	101
3.9	VALIDAÇÃO DO MODELO.....	104
3.10	CONSIDERAÇÕES FINAIS DA METODOLOGIA.....	106
4.	RESULTADOS E ANÁLISE.....	108
4.1	RESULTADOS DA CARACTERIZAÇÃO DO SPRAY	108
4.2	RESULTADOS DA CARACTERIZAÇÃO DA COMBUSTÃO	115
4.2.1	Resultados da Velocidade de Chama Laminar	115
4.2.2	Resultados da Massa Específica e Temperatura média.....	116
4.2.3	Resultados da Temperatura de Combustão	117

4.2.4	Resultados que Caracterizam as Flutuações de Turbulência.....	117
5	CONCLUSÕES.....	118
5.1	Conclusões sobre as Metodologias Utilizadas.....	118
5.2	Conclusões sobre os Resultados Obtidos	119
5.3	Conclusões sobre as modificações dos modelos e as suas limitações.....	120
5.4	Sugestões para Trabalhos Futuros	121
5	BIBLIOGRAFIA	122
6	APENDICE I – ROTINA COMPUTACIONAL PARA SIMULAÇÃO DO MOTOR COM OPENFOAM.....	132

1. INTRODUÇÃO

O motor de combustão interna tem sido utilizado por mais de 140 anos em automóveis e veículos em geral. Novas tecnologias e sistemas estão sendo aplicados aos motores de combustão interna para conseguir um melhor aproveitamento do combustível e uma menor emissão de poluentes. Dentre as novas tecnologias se destaca a utilização da injeção direta aplicada em motores de ignição por centelha. Com a crescente inserção desta tecnologia no mercado automobilístico, a caracterização da atomização do combustível, *spray*, e a caracterização da combustão são fatores primordiais visto que a formação do *spray* pode ocorrer de maneira irregular, com uma grande variedade de tamanho de gotas, ângulos de cone, penetrações, distribuições de tamanhos de gotas, campos de velocidades e comprimentos de quebra do filme líquido, o que impacta a combustão.

Nesse contexto, a simulação computacional constitui uma ferramenta importante para suprir as necessidades da engenharia na melhoria e no desenvolvimento de novos produtos. Segundo Piscaglia (2019) as ferramentas de simulação têm sido utilizadas em projetos conceituais de novos equipamentos e processos, permitindo uma redução nos custos em relação a testes de laboratório e aumento de escala.

A fluidodinâmica computacional ou CFD (*Computation Fluid Dynamic*) mostrou-se uma ferramenta importante para a simulação de processos em motores de combustão interna e muitos programas comerciais e livres se encontram disponíveis para realizar este estudo. Os códigos CFD são amplamente utilizados para chegar a soluções de projeto e a principal vantagem do estudo CFD é a sua capacidade de prever os valores espaciais e temporais das propriedades do fluido em todo o domínio do motor. Embora existam vários códigos comerciais de CFD tais como, Star-CD, FIRE, FORTE, Fluent, Kiva, dentre outros disponíveis no mercado, as empresas e indústrias estão interessadas em adotar programas menos onerosos. Por esse motivo, o OpenFOAM (*Open Field Operation and Manipulation - Operação e Manipulação de Campo Aberta*) que é um programa CFD de código aberto e gratuito, atraiu crescente atenção das organizações comerciais e acadêmicas desde o seu primeiro lançamento em 2004.

Diante deste contexto esta tese contempla os principais modelos matemáticos utilizados para estudar o comportamento do *spray* de combustível e da combustão da mistura. Tais modelos matemáticos são analisados e ajustados com o objetivo de ajustar os principais parâmetros às condições reais do *spray* de combustível e da combustão da mistura em uma

câmara de combustão. A posteriori são apresentados inéditos modelos desenvolvidos neste trabalho capazes de caracterizar a quebra primária do *spray* de combustível; um novo modelo capaz de descrever o comportamento de colisão entre as gotas de combustível; e por fim, é apresentado um inédito modelo de combustão capaz de caracterizar a turbulência da chama.

1.1 Objetivos

O objetivo geral desta tese é desenvolver um modelo de quebra primária e aplicar uma metodologia no ambiente aberto de programação do OpenFOAM para avaliar o comportamento do *spray* de combustível e da combustão da mistura ar/combustível em uma câmara de combustão de um motor monocilíndrico de injeção direta de combustível.

A fim de alcançar o objetivo geral, estabeleceram-se os seguintes objetivos específicos:

- a) Descrever os principais modelos matemáticos para a caracterização do *spray* e da combustão da mistura à luz do OpenFOAM e da literatura;
- b) Definir a geometria da câmara de combustão, as malhas e as condições de contorno dos *sprays* de combustível a serem estudados;
- c) Estudar as características da atomização do combustível diretamente injetado dentro da câmara de combustão;
- d) Criar e verificar o inédito modelo numérico do *spray* de combustível desenvolvido comparando os resultados obtidos com dados experimentais e da literatura;
- e) Verificar e analisar os modelos de combustão no motor monocilíndrico de pesquisa;
- f) Verificar o modelo de combustão implementado comparando os resultados obtidos com dados experimentais e da literatura, em uma câmara de combustão com injeção direta;
- g) Elaborar uma rotina computacional para a simulação de motores no OpenFOAM.

1.2 Organização do documento

Este trabalho está dividido em sete capítulos, sendo o primeiro esta introdução onde são apresentados de forma clara os motores de combustão interna e o programa que foi utilizado para estudar o comportamento dessas inovações. Além disso, são apresentados os objetivos do trabalho. No segundo capítulo são descritos os conceitos fundamentais e os principais

trabalhos desenvolvidos pela comunidade científica relacionados ao tema desta tese. No terceiro capítulo descreve-se a metodologia da simulação necessária para o desenvolvimento deste trabalho. Também são apresentadas as metodologias empregadas nos modelos matemáticos e do desenvolvimento das malhas e das condições de contorno. No quarto capítulo são apresentados os resultados obtidos depois de aplicar as metodologias descritas no capítulo três. No quinto capítulo são apresentadas as conclusões obtidas. No sexto capítulo são apresentadas as referências bibliográficas, e por fim o sétimo capítulo contém um apêndice que consiste num detalhamento explicativo e sequencial de como realizar simulações no OpenFOAM de um motor de combustão interna.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 INTRODUÇÃO

Recentes pesquisas e desenvolvimentos no campo dos motores de combustão interna abordam um amplo aspecto de soluções tecnológicas promissoras as quais propõem melhorar a eficiência ao utilizar o combustível e reduzir as emissões dos gases poluentes. Em consonância com o estudo desta tese, este capítulo apresenta uma revisão bibliográfica dividida em três partes. Na primeira parte são apresentados os principais conceitos e elementos relacionados a injeção direta, os parâmetros importantes associados aos *sprays* e a combustão da mistura gerado pela injeção direta, os combustíveis utilizados neste trabalho e os conceitos básicos da fluidodinâmica computacional. A segunda parte apresenta os fundamentos do OpenFOAM detalhando os modelos implementados para a caracterização dos parâmetros relacionados ao *spray* de combustível e a combustão da mistura em um motor de combustão interna com injeção direta. Por fim, a terceira parte apresenta um estudo organizado em temas de interesse da pesquisa, considerando trabalhos desenvolvidos em CFD em motores de combustão interna com sistema de injeção direta de combustível.

2.2 FUNDAMENTOS BÁSICOS

Para idealizar e criar modelos físicos matemáticos capazes de caracterizar o *spray* de combustível e a combustão da mistura é necessário compreender a importância e a evolução dos motores de combustão interna no contexto de projetos.

2.2.1 Sistema de Injeção Direta

A tecnologia da injeção direta é uma das novas modernizações aplicadas aos motores de combustão interna de ignição por centelha para reduzir o consumo de combustível e as emissões de CO₂. De acordo com um Relatório da Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos, EPA (2008), o sistema de injeção direta tem o potencial de reduzir as emissões de CO₂ em torno de 20% a 26%, quando comparado à injeção de combustível no pòrtico em um motor de ignição por centelha naturalmente aspirado.

O motor de injeção direta de gasolina, GDI – *Gasoline Direct Injection*, primeiramente foi aplicado em aeronaves. Este motor foi criado pelo inventor francês Leon Lavavasseur em 1902 e sua primeira aplicação foi nos motores aeronáuticos V8, (HARTMANN, 2007). Após a primeira guerra mundial, o primeiro protótipo de um motor GDI foi o motor Hesselman de 1925, onde uma estratégia de mistura pobre e queimas tardias foi utilizada. A princípio o motor funcionava com gasolina, mas depois foi adaptado para diesel ou querosene, OLSSON (1987) e LINDH (1992). Os motores GDI foram usados extensivamente durante a Segunda Guerra Mundial para alimentar aeronaves de alto desempenho fabricadas na Alemanha, na União Soviética e nos EUA. A primeira aplicação automotiva de um motor GDI foi desenvolvida pela Bosch e introduzida por Goliath e Gutbrod em 1952, que usava o sistema de injeção de alta pressão de um motor diesel com um acelerador de admissão para controle de carga. Esses motores são classificados como motores GDI de “primeira geração”.

A crise energética do início da década de 1970 fomentou a pesquisa e a busca por motores mais eficientes em termos de consumo e o desenvolvimento de motores GDI de “segunda geração”. Uma pesquisa foi conduzida pela American Motors Corporation para desenvolver um sistema de injeção contínua de combustível estratificada (*Straticharge Continuous Fuel Injection- SCFI*), onde o motor de combustão interna, MCI, foi modificado para ter dois sistemas de injeção de combustível separados, com diferentes pressões de injeção.

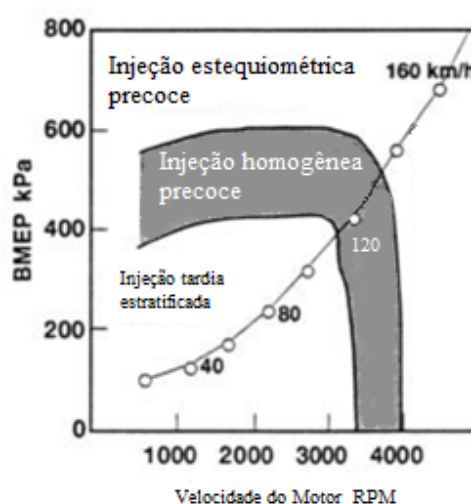
O motor não teve sucesso devido a problemas de controle mecânico do sistema de injeção de combustível, PEERY (1975) e WEISS (1979). No final da década de 1970, foram propostos vários sistemas GDI, incluindo o sistema MAN-FM que utilizou a interação *jet-wall* e a evaporação do filme para obter a estratificação de carga e a Ford Motor Company desenvolveu o motor ‘PROCO’, um motor GDI de carga estratificada, utilizando uma bomba de alta pressão e vela de ignição na periferia do *spray* de combustível para gerar estratificação. O último projeto não teve êxito por várias razões, tais como: a tecnologia de controle eletrônico, os componentes do sistema de combustível eram de alto custo, o regime de combustão pobre gerado pela estratégia de carga estratificada gerou alta emissão de óxidos de nitrogênio (NOx). Outro desenvolvimento foi o conceito de carga estratificada que utilizou uma pré-câmara para injeção e ignição de uma mistura relativamente rica onde a chama se propaga para a mistura pobre da câmara principal, PISCHINGER e KLOCKER (1974). Todos os desenvolvimentos apresentaram uma desvantagem comum, a falta de controle da estratégia de injeção em função da carga do motor. Estes conceitos encontraram

problemas importantes, incluindo a diluição do combustível, o aumento das emissões e o aumento do consumo de combustível. Estes eram inevitáveis até que as melhorias na tecnologia do sistema de injeção de combustível estivessem disponíveis.

Desde o início da década de 1990, o interesse e o desenvolvimento do motor GDI renasceram e com a nova geração de motores GDI classificados como “terceira geração”. A introdução de motores GDI de terceira geração na produção foi em grande parte liderada pelos fabricantes japoneses da Mitsubishi, Nissan e Toyota, mas agora existem exemplos de tecnologia GDI aplicada por muitos fabricantes automotivos.

De acordo com Iwamoto *et. A.* (1997) a Mitsubishi foi a primeira a apresentar um motor GDI no mercado japonês em 1996, sob a forma de 1.8L em linha. A Figura 2.1 ilustra três modos de injeção de combustão através da pressão média efetiva de frenagem (BMEP) em função da velocidade e carga do motor.

FIGURA 2.1 – O Mapa de Controle de um Mitsubishi GDI

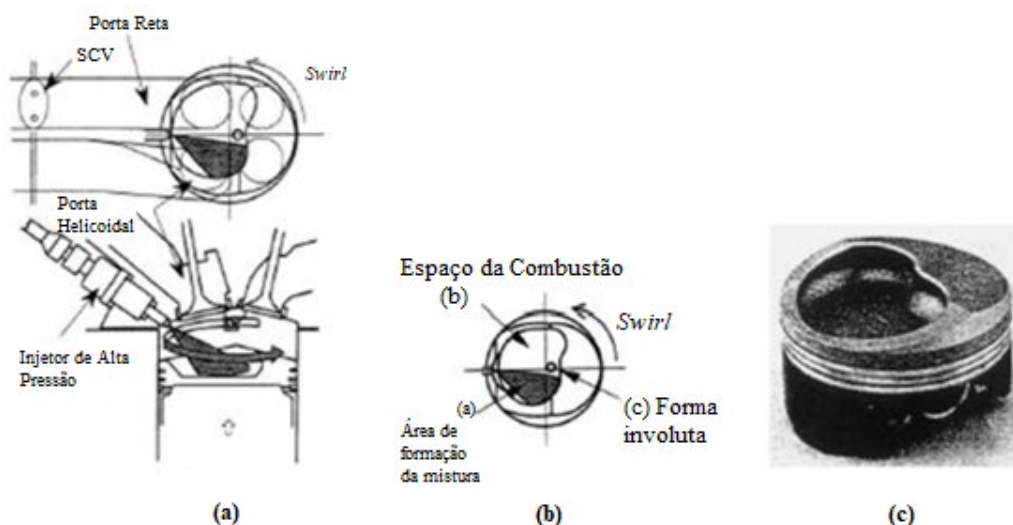


FONTE – adaptado de IWAMOTO, NOMA, NAKAYAMA, *et al.* (1997)

A Nissan foi o próximo fabricante a trazer um motor GDI para a produção no mercado japonês em 1997. Utilizando uma estratégia de combustão semelhante à do motor Mitsubishi, mas com um volume menor destinado a combustão e um movimento de carga bem definido. Isso proporcionou uma melhora na eficiência de combustão durante a operação de combustão homogênea. No entanto, comprometeu-se a precisão do direcionamento por atomização durante a operação estratificada por injeção tardia. Isto foi supostamente reduzido através do projeto de *spray* injetado otimizado, ZHAO, LAI e HARRINGTON(1999).

Apenas em 1998 a Toyota trouxe um motor GDI de produção para o mercado japonês, que foi utilizado em vários modelos de veículos e é mostrado na Figura 2.2 (a). A Toyota também utilizou um movimento de carga no cilindro dominado por um vórtice, controlado ativamente por uma Válvula de controle de vórtice (SCV), mas empregou uma geometria única e complexa do pistão para o controle de atomização e mistura. A geometria da cabeça do pistão, mostrada na Figura 2.2 (c), é composta por três características principais, conforme descrito na Figura 2.2 (b). Primeiro, uma geometria involuta para direcionar o combustível vaporizado para a vela de ignição. Em segundo lugar, uma área projetada como um espaço de formação de mistura posicionada a montante da vela de ignição. Terceiro, uma zona mais larga, projetada como o espaço de combustão, promovendo uma mistura rápida, melhorada pelo movimento de vórtice gerado na porta, ZHAO, LAI e HARRINGTON (1999).

FIGURA 2.2 – Configuração da câmara de combustão do Toyota GDI



FONTE – adaptado de NOHIRA (1997)

Posteriormente, os motores GDI foram trazidos à produção por um número crescente de fabricantes de automóveis em mercados japoneses, europeus e norte-americanos. Empresas como a Renault, a VAG (incluindo a Volkswagen, Audi e depois a Seat e Skoda), Ford, BMW, General Motors, Isuzu, Mazda, Mercedes-Benz, Ferrari, Jaguar e Land Rover, todos lançando motores GDI em produção em vários mercados e em vários segmentos de veículos entre 1998 até a presente data. Os desenvolvimentos de tecnologias centraram-se

em torno das características do *spray* do injetor (incluindo o padrão do *spray* e a pressão de injeção) e a geometria da câmara de combustão e, portanto, técnicas de controle de mistura.

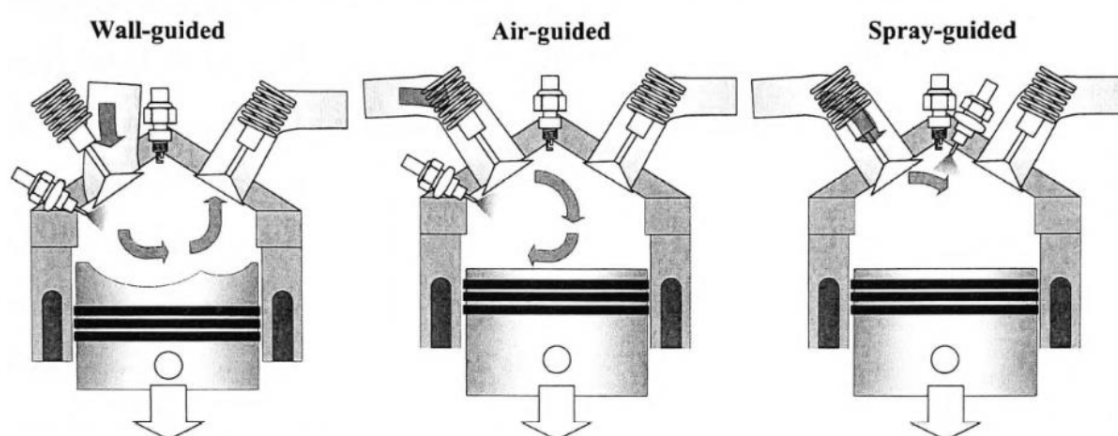
O modo de operação da combustão dos motores GDI é tipicamente definido pelo grau de estratificação da carga no cilindro e a estratégia usada para conseguir isso.

De acordo com Yi *et al.* (2004) e Cathcart e Zavier (2000) os motores de injeção direta de carga homogênea tendem a usar uma vela de ignição posicionada centralmente com injetor montado na parte central ou lateral. O combustível é injetado no início do curso de admissão durante altos níveis de movimento de carga no cilindro para promover a mistura e obter uma mistura quase homogênea dentro da câmara de combustão no ponto de sincronização da ignição. As vantagens dos motores de injeção direta de carga homogênea em relação aos motores tradicionais de carga homogênea PFI, *Port Fuel Injection*– Injeção de Combustível no Pórtico, incluem:

- Eliminação do tempo de permanência transitória e da redução dos hidrocarbonetos não queimados;
- Redução dos hidrocarbonetos não queimados durante o início a frio devido à injeção em um ambiente de pressão e temperatura mais alto quando comparado ao PFI, onde o combustível é injetado em ambiente de baixa pressão e temperatura do orifício de admissão e parte traseira da válvula de admissão;
- Aumento da energia e da economia de combustível e redução da propensão a detonação como consequência do efeito de arrefecimento da carga de injetar combustível frio na câmara de combustão de alta temperatura de alta pressão.

Segundo Nishiyama *et al.* (2019) os motores de injeção direta de carga estratificada envolvem a criação de uma mistura de combustível e ar no cilindro globalmente pobre, mas com altos níveis de estratificação em torno da vela de ignição, o que garante o desenvolvimento estável do núcleo de chama. Para obter estratificação de carga, três métodos de guia de atomização evoluíram como mostrado na Figura 2.3. Tais métodos são os guiado por parede (*wall-guided*), guiado a ar (*air-guided*) e guiado por atomização (*spray-guided*), cada um conduzindo uma estratégia de projeto de sistema de combustão diferente.

FIGURA 2.3 – Estratégias orientadoras de atomização



FONTE – MA (2006)

Alguns dos primeiros motores GDI de carga estratificada usaram guias de parede, *Wall-guided*, para produzir a carga estratificada em torno da vela de ignição no ponto de ignição. À medida que a injeção de combustível aumenta com os requisitos de carga, a umidade do pistão e as conseqüentes emissões de fuligem limitam a operação de carga estratificada. Portanto, manter a densidade de potência exige mudar para um modo de operação de carga estequiométrica homogênea em cargas mais altas do motor. A adição de um modo de operação de “modo misto” ou homogêneo de mistura pobre também é, às vezes, incorporada para melhorar a estabilidade da combustão ao alternar entre os modos estequiométricos estratificados e homogêneos. Isso também fornece benefícios de consumo de combustível associados a misturas de cilindro incorporadas globalmente para maiores velocidades e faixas de carga dentro do ciclo de trabalho do motor.

Segundo Yin *et al.* (2016), os motores de injeção direta com carga estratificada orientados pelo ar, *air-guided*, utilizam um grande movimento de ar no cilindro, induzido fortemente, para direcionar o combustível injetado em direção à vela de ignição. Um pistão nestas condições é frequentemente utilizado, como visto em sistemas guiados por parede, mas a afinação da geometria da porta de admissão também é utilizada para aumentar o movimento *do spray* e reduzir o impacto da injeção de combustível no pistão.

De acordo com Zheng *et al.* (2015) os motores de injeção direta de carga estratificada orientados pelo *spray*, *spray-guided*, utilizam um injetor montado centralmente, posicionado perto dos elétrodos da vela de ignição. Neste método, o *spray* é posicionado de modo que a mistura de combustível e ar na vela de ignição esteja próxima da estequiometria, mas com altos níveis de estratificação, longe da posição da vela de ignição. A proximidade

do injetor e da vela de ignição promove uma nuvem de *spray* compacta que pode ser projetada com penetração reduzida, reduzindo a chance de impacto e melhorando a fase de combustão ao promover taxas de combustão elevadas e variabilidade cíclica reduzida. As desvantagens da proximidade do injetor e da vela de ignição incluem: altas velocidades de escoamento no cilindro (e flutuações associadas) na vela de ignição e impacto do combustível em eletrodos da vela de ignição e potenciais problemas de ignição.

Conforme Beavis (2016) a quebra do *spray* de combustível em motores de injeção direta foi tipicamente reduzida pelo uso de alta pressão de injeção para produzir *sprays* de combustível com características mais detalhadas e atomizadas. Em contraste com os sistemas de injeção PFI com o Diâmetro Médio de Sauter, SMD, equivalente a $\sim 120\mu\text{m}$, os injetores GDI possuem diâmetros na magnitude inferior a $\sim 15\mu\text{m}$. Enquanto o aumento da pressão de injeção aumenta a atomização do combustível, ela reduz o tamanho das gotículas. Há também um aumento nas velocidades das gotículas e, portanto, pode causar um aumento líquido no impulso de atomização e ainda causar problemas de impacto. A penetração resultante é dependente do tempo de injeção, características da atomização e condições do cilindro. O progresso adicional na redução do impacto no pulverizador foi ativado com padrões de atomização não simétricos, tempo de injeção variável e múltiplas injeções por ciclo para reduzir a penetração de atomização em cada evento de injeção.

A legislação acerca da emissão de CO_2 dos automotores está cada vez mais rigorosa e isso fez com que muitos fabricantes começassem a estudar o GDI e outras tecnologias para novas melhorias na eficiência de combustível. Os motores GDI combinados com a redução do volume percorrido e o peso de um motor (*downsizing*) e a indução forçada para reter produção de energia específica tem sido um desenvolvimento significativo na Europa há vários anos e está crescendo entre os fabricantes de automóveis nos mercados dos EUA e do Japão. Lake *et al.* (2004), da Ricardo PLC, produziram um artigo que apresenta uma série de conceitos de turbo alimentação aplicados a um motor GDI como forma de atender aos futuros requisitos de CO_2 da frota futura, ao mesmo tempo que controla o requisito de octanos para evitar a auto-ignição de gás. A Lotus Cars também investigou os motores GDI homogêneos guiados pelo *spray* equipados com um sistema de trem de válvula totalmente variável como meio de reduzir os óxidos nitrosos a níveis que eliminariam a necessidade de uma armadilha de NO_x , proporcionando compatibilidade com combustíveis com alto teor de enxofre (Drake e Haworth, 2007; Zhao, Lai e Harrington, 1999).

De acordo com Sherman (2017), metade da frota de automóveis e caminhões dos Estados Unidos são equipados com o sistema de injeção direta de combustível. O conceito é

bastante direto, o injetor de combustível deixa de estar na entrada do sistema de admissão e fica posicionado diretamente na câmara de combustão, conforme mostra a Figura 2.4.

FIGURA 2.4 – Representação do Sistema de Injeção Direta



FONTE – BOSCH (2013)

A injeção direta de combustível opera a alta pressão, bem maior do que a injeção de combustível no pórtilo. Associar a elevada pressão com o controle preciso oferecido pelos modernos microprocessadores tem um enorme efeito na sincronização do motor, especialmente quando esse motor é turbo alimentado. O resultado é economia de combustível e mais potência para um determinado tamanho do motor, além de menores emissões de gases poluentes.

Contudo, preparar o combustível retirado do tanque para inflamar dentro do motor é um processo que pode ser dividido em duas etapas. A primeira etapa é quebrar o líquido em gotículas finas, conseguindo escoar a gasolina e/ou etanol pressurizado por uma bomba através de pequenos orifícios do injetor. Segundo Sherman (2017), um estudo realizado pelos engenheiros da Hitachi revelou que o combustível pressurizado para 1000 Psi (~68,9 Bar, ~6,89 MPa) e injetado através de orifícios variando de 0,006 a 0,011 polegadas (~0,152 a 0,279 milímetros) de diâmetro produziu uma névoa de 135 mph (~217 Km/h, ~60m/s) de gotículas com apenas $3 \cdot 10^{-6}$ polegadas (~ $7,62 \cdot 10^{-5}$ milímetros) de diâmetro.

Os avanços na injeção direta são a razão pela qual os motores de gasolina com turbocompressor são tão comuns, desde automóveis econômicos até sedãs de luxo.

2.2.2 Parâmetros Associados aos Sprays gerados pela Injeção Direta de combustível

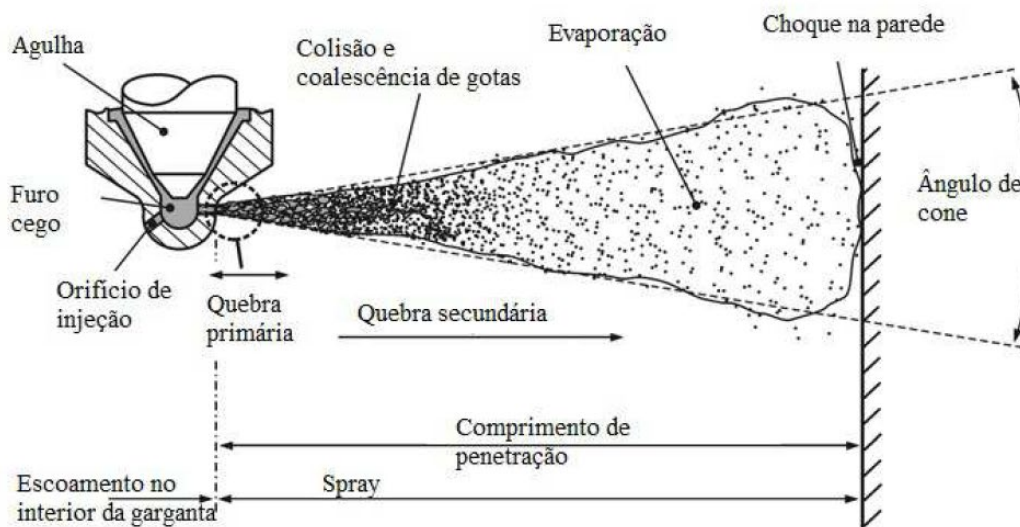
Segundo Lefebvre (2017) os processos de pulverização são inerentemente caóticos e aleatórios em natureza. Além disso, o spray resultante é resultado de várias etapas complexas, começando com o comportamento dentro do próprio atomizador. A transformação do líquido intacto em gotículas envolve vários processos dinâmicos.

De acordo com Heywood (1988) assim que o jato de combustível líquido deixa o orifício do injetor ele se mistura com o ar ao seu redor. O jato líquido rapidamente se desintegra em pequenas gotículas que tendem a manter a direção geral de movimento do jato original. (LEFEBVRE, 2017).

Rocha (2015) afirma que a forma do *spray* de combustível injetado é aproximadamente cônica e é caracterizada pelo ângulo de cone e penetração do jato. O ângulo de cone é determinado pela delimitação das bordas do *spray* constituídas pela quebra do combustível e a penetração depende da distância do orifício do injetor até alguma posição do combustível no eixo de quebra, sendo que ela pode ser definida como a distância máxima percorrida pelo *spray* quando injetado no meio gasoso estático. De acordo com Baumgarten (2006), ângulos menores de cone permitem uma maior penetração do *spray* e, ao longo do *spray*, o líquido se encontra vaporizado, o que é efeito das forças aerodinâmicas que são contrárias ao movimento das gotículas.

A imagem da Figura 2.5 representa o comportamento típico da atomização do combustível ao sair do injetor. Pode-se analisar o comportamento da atomização do combustível com o passar do tempo.

FIGURA 2.5 – Esquema de um spray mostrando a penetração, o ângulo de cone, e as desintegrações primária e secundária.



FONTE:BAUMGARTEN (2006).

A função da quebra não é somente desintegrar o líquido em pequenas gotículas, mas também descarregar essas gotículas em um meio gasoso com a forma de um *spray* cônico uniforme e simétrico. Atomizadores de orifício plano produzem *sprays* com ângulos estreitos e com uma dispersão de gotículas uniforme por todo o volume do cone. *Sprays* com essas características são denominados como sólidos. Quebras do tipo *swirl* também podem produzir *sprays* sólidos, mas para a maior parte das aplicações o *spray* é formado por um cone oco com a maior parte das gotículas concentradas em sua periferia. (LEFEBVRE, 2017).

Os atomizadores de orifício plano, por produzirem um *spray* sólido e com estreito ângulo de cone estão menos sujeitos a um grau muito significativo dos efeitos de resistência do ar sobre os *sprays* produzidos. Assim a distribuição do *spray* como um todo é determinada principalmente pela magnitude e direção da velocidade na saída (orifício) do atomizador. A situação é inversa para os atomizadores do tipo *swirl* onde o maior grau de dispersão torna mais significativa a influência da resistência do ar por haver maior superfície de contato gás/líquido. Segundo Baumgarten (2006), normalmente qualquer aumento no ângulo do cone do *spray* irá aumentar o grau de influência da resistência do ar levando a uma melhor quebra. Essa é uma razão que justifica a importância da caracterização do ângulo de cone para os atomizadores do tipo *swirl*. (LEFEBVRE, 2017).

As particularidades do injetor piezoelétrico também apresentam influência nas características do *spray*, já que cada injetor apresenta uma determinada geometria, com distintas quantidades de furos, com diâmetros e posições específicas. Além da geometria, a temperatura e pressão de injeção, o tipo de combustível e o meio em que o combustível é injetado alteram as propriedades do *spray*, pois suas características dependem de propriedades físicas do combustível, tais como tensão superficial e viscosidade, e da massa específica do meio gasoso. Essas propriedades têm grande influência no ângulo de cone do *spray* ou penetração.

Baumgarten (2006) ainda sinaliza que existem diferentes tipos de cones, devido a variações nos mecanismos de funcionamento dos injetores. As principais estruturas são os *sprays* de cone sólido (*full cone*) e os cones ocos (*hollow-cone*).

2.2.2.1 Dispersão

Quando em um determinado instante o volume de líquido dentro do cone for conhecido, a dispersão de uma quebra pode ser expressa quantitativamente. O grau de dispersão poderá então ser expresso como a razão do volume do *spray* com a razão do volume de líquido contido no mesmo. (GUZZO, 2012)

Quanto maior for o grau de dispersão maior será a taxa de evaporação, pois o líquido irá se misturar rapidamente com a atmosfera gasosa. Os atomizadores de orifício plano que produzem *sprays* com ângulos de cone estreitos provocam pequenas dispersões.

Para que se alcance uma máxima dispersão do líquido em pressões de injeção moderadas e pressões ambientes baixas, *spray* cônicos ocos são normalmente utilizados. Eles são normalmente conhecidos por produzirem gotas com pequenos diâmetros, efetiva formação de mistura, penetração reduzida e, conseqüentemente, alta eficiência de quebra. De uma forma geral, os fatores que influenciam no aumento do ângulo do cone também tendem a aumentar a dispersão do *spray*. (LEFEBVRE, 2017).

2.2.2.2 Penetração

Penetração é definida como a máxima distância alcançada quando o *spray* é injetado em uma atmosfera estática. No exato momento em que o jato líquido do atomizador escoar

através do orifício de saída dele, forças externas do meio competem com as forças internas do líquido e tensões superficiais e, então, se inicia um processo destrutivo do filme líquido formado neste canal de saída.

As características de penetração dos *sprays* são importantes e variáveis de acordo com a geometria da câmara de combustão. Segundo Zhao (2002) as características da penetração dos injetores de injeção direta de gasolina são influenciadas por algumas variáveis operacionais, dentre as principais estão a pressão e a massa específica dentro da câmara de combustão, a pressão de injeção, a temperatura do injetor e a volatilidade do combustível.

Lefebvre (1989) cita alguns parâmetros operacionais que possuem pouca influência na penetração induzida por injetores de injeção direta e geralmente podem ser ignorados. O primeiro parâmetro de pouca influência citado é a taxa de pulsos do injetor, que é o período em milissegundos entre as injeções. Se a taxa de repetição é 100 ms, 50 ms ou 33 ms (10Hz, 20Hz ou 30Hz), a curva de penetração do *spray* é apenas levemente alterada. O segundo parâmetro constitui na duração do pulso de injeção que pode ter um efeito significativo na distância máxima de penetração, mas um efeito muito pequeno na taxa máxima de penetração (velocidade de penetração). Ainda segundo Lefebvre (1989) a taxa máxima de penetração é alterada apenas por durações de pulsos muito pequenas (geralmente menor que 1 milissegundo). Isto ocorre porque a taxa máxima de penetração ocorre próximo ao atomizador e normalmente bem no início da injeção.

2.2.2.3 Ângulo de Cone

Segundo Baumgarten (2006), o fator de maior influência no ângulo de cone do *spray* cônico oco e na penetração é a massa específica do gás com o qual ele entra em contato. No entanto, experimentos mostrados por Gindele (2001) e Homburg (2002) mostraram que ambientes de altas pressões podem diminuir consideravelmente o ângulo de cone e a penetração, além de contribuir para o aumento do diâmetro médio de gotas. Esse comportamento é extremamente desfavorável para o uso de injetores *swirl* em motores de injeção direta. Dependendo do momento da injeção, a pressão da câmara de combustão pode variar muito, de forma que diversas estruturas de *spray* possam ser formadas provenientes de um mesmo injetor, o que pode comprometer a qualidade da mistura. (AMORIM, 2016).

2.2.2.4 Comprimento de quebra (*breakup*)

O comprimento de quebra ou *break-up* segundo Fajgenbaum (2013) é caracterizado pela variável que mede a distância desde o orifício de injeção até o ponto onde o filme líquido inicia sua quebra em ligamentos e deixa de ser contínuo.

Baumgarten (2006) relata que, dependendo da velocidade relativa e das propriedades do líquido e do gás circundante, o comprimento de quebra de um jato de líquido pode ser controlado por diferentes mecanismos. Estes diferentes mecanismos são normalmente caracterizados pela distância entre o orifício do injetor e o primeiro ponto de formação das gotas, essa distância é denominada de comprimento de quebra, *break-up*.

2.2.2.5 Diâmetro médio das gotas

As gotas de *sprays* de injetores de combustível possuem tamanhos variados devido a interações entre elas e à sua própria natureza heterogênea (LEFEBVRE, 2017). A fim de se criar um parâmetro de quebra relacionado com os diâmetros das gotas dos *sprays*, estabeleceu-se uma média de diâmetros que pudesse representar um grupo amostral de gotas. Nesse sentido, Mugele e Evans (1951) propuseram uma relação geral para determinar o diâmetro médio das gotas de *sprays* formados por injetores (Equação 2.1).

$$D_{ab} = \left(\frac{\sum_{i=1}^{\infty} N_i \cdot D_i^a}{\sum_{i=1}^{\infty} N_i \cdot D_i^b} \right)^{\frac{1}{a-b}} \quad (2.1)$$

Em que D é o diâmetro representativo dado em metros, a e b são os índices que dependem do tipo de média que se quer calcular e N é o número de gotas de uma determinada amostra contendo o diâmetro D.

Como sugerido por Mugele e Evans (1951), importantes valores médios podem ser encontrados na tabela 2.1

Tabela 2.1 – Diâmetro médio das gotas e suas aplicações.

a	b	a+b (ordem)	Símbolo	Diâmetro médio	Expressão	Aplicação
1	0	1	D ₁₀	Aritmético	$\frac{\sum N_i \cdot D_i}{\sum N_i}$	Comparações
2	0	2	D ₂₀	Superficial	$\left(\frac{\sum N_i \cdot D_i^2}{\sum N_i}\right)^{\frac{1}{2}}$	Controle de área superficial
3	0	3	D ₃₀	Volumétrico	$\left(\frac{\sum N_i \cdot D_i^3}{\sum N_i}\right)^{\frac{1}{3}}$	Controle de volume, e.g., Hidrologia
2	1	3	D ₂₁	Superfície-aritmético	$\frac{\sum N_i \cdot D_i^2}{\sum N_i}$	Absorção
3	1	4	D ₃₁	Volume-aritmético	$\left(\frac{\sum N_i \cdot D_i^3}{\sum N_i \cdot D_i}\right)^{\frac{1}{2}}$	Evaporação, Difusão molecular
3	2	5	D ₃₂	Sauter (SMD)	$\frac{\sum N_i \cdot D_i^3}{\sum N_i \cdot D_i^2}$	Transferência de Massa, Reação
4	3	7	D ₄₃	De Brouckere ou Herdan	$\frac{\sum N_i \cdot D_i^4}{\sum N_i \cdot D_i^3}$	Combustão, Equilíbrio

Autor: Adaptado de Lefebvre (2017).

Segundo Bayvel e Orzechowski (1993) e Lefebvre (2017), o diâmetro médio é uma variável que fornece uma avaliação sobre a qualidade da quebra e não fornece informação sobre a gota em si, ou seja, não fornece informações a respeito da distribuição de tamanhos das gotas.

2.2.3 Combustíveis

Considerando que nas simulações realizadas neste trabalho são utilizados apenas dois combustíveis na câmara principal, sendo estes a gasolina comum e o etanol, apenas estes combustíveis são descritos na revisão bibliográfica. A gasolina comum, também denominada no Brasil como gasolina C ou E27, é composta de 73% de gasolina A e 27% de etanol anidro em volume. O etanol utilizado nos modelos é o etanol comum, também denominado de etanol hidratado, por ser composto de 96% de etanol anidro e 4% de água destilada em volume. (ANP, 2018); (CHIAPINOTTO, 2017).

2.2.3.1 Gasolina

De acordo com a Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, ANP (2017) a gasolina é o segundo combustível mais consumido no Brasil, vindo logo atrás do óleo diesel.

Ainda de acordo com a ANP (2017), existem dois tipos de gasolinas comercializadas no Brasil, a gasolina tipo A que não possui adição de etanol e a gasolina tipo C, que possui adição obrigatória de etanol anidro.

A gasolina tipo A, ou Premium tem octanagem mínima de 91 unidades, já a gasolina tipo C, ou comum, possui octanagem mínima de 87 unidades. Ambas as medidas são pelo índice antidetonante, IAD, e até 50 mg/kg, ou ppm, de teor de enxofre. Os dois tipos de gasolina possuem ultrabaixo teor de enxofre, UBTE ou S-50, PETROBRAS (2018).

2.2.3.2 Etanol

O etanol é um biocombustível pois é produzido através da cana-de-açúcar, o que auxilia na redução do gás carbônico da atmosfera a partir da fotossíntese que acontece nos canaviais. Ao utilizar esse combustível de acordo com as regulamentações governamentais brasileira, o etanol poderá ser adicionado à gasolina. (PETROBRAS, 2018). Mas cabe salientar que, o combustível que abastece os veículos movidos a álcool ou a mistura álcool-gasolina é o álcool etílico hidratado, que se caracteriza por sua apresentação límpida e incolor. Já o produto que é adicionado à gasolina é o álcool etílico anidro, que recebe adição de corante laranja.

Analisando a gasolina e o etanol, nota-se que este último possui maior calor latente de vaporização, maior número de octanos, maior velocidade de propagação de chama e menor razão ar /combustível estequiométrica. No entanto, o etanol possui menor taxa de evaporação em ambientes de baixas temperaturas antes da combustão, o que pode vir a ocasionar combustão incompleta, HUANG *et al.*, (2015).

2.2.4 Dinâmica dos Fluidos Computacional

A Dinâmica dos Fluidos Computacional ou *Computational Fluid Dynamics* (CFD) pode ser descrita como uma técnica computacional adotada para realizar numericamente a

análise de grandezas que sofrem uma variação no espaço e/ou no tempo. Tal técnica é utilizada em problemas de campo típicos da mecânica do contínuo. O resultado de simulações CFD tem sido utilizado na predição, interpretação e visualização da solução das equações de conservação em problemas envolvendo o escoamento de fluidos e seus respectivos processos de transferência de massa e energia. A presente seção não tem como objetivo fundamentar todos os conceitos já desenvolvidos acerca do assunto, mas sim referenciar métodos e algoritmos adotados como base para o desenvolvimento da metodologia proposta. Versteeg e Malalasekera(1995) e Schäfer(2006) podem ser citados como referências sobre a área multidisciplinar da fluidodinâmica computacional.

Uma simulação CFD pode ser dividida nas seguintes etapas:

- a) Construção da geometria: modelo computacional capaz de representar a geometria física real;
- b) Construção da malha: subdivisão imposta na geometria para solução do problema através de um método numérico baseado na discretização espacial;
- c) Pré-processamento: modelagem física do problema, ou seja, definição das equações que governam o problema e respectivas condições de contorno e condições iniciais, equações constitutivas e propriedades dos materiais;
- d) Solução: solução do problema através do uso de uma técnica numérica adotada para a discretização das equações diferenciais parciais e subsequente solução do sistema de equações algébricas ou algébrico-diferenciais obtido;
- e) Pós-processamento: técnica computacional para a visualização da geometria, malha e resultados das variáveis de campo.

2.2.4.1 Construção da Geometria e da Malha

Uma das primeiras ações para a simulação é a geração de uma geometria sólida fechada. Posterior a essa tarefa, passa-se para a essência dessa etapa que é elaborar uma malha que forneça dados para o pré-processador. Cabe salientar que é no pré-processador que os inúmeros modelos físicos são implementados. Os estágios fundamentais para a construção da geometria e da malha são: i) definir a geometria da seção de estudo; ii) Criar

as seções nas quais o fluido de trabalho se deforma e cria-se os nomes das superfícies de contorno; iii) Definir as características da malha.

2.2.4.2 Pré-processamento

Essa etapa é responsável por fornecer as informações ao *solver*. Como a malha é alocada no pré-processador e nela contém as equações físicas que representa o problema.

2.2.4.3 Solução

Solver são arquivos executáveis responsáveis pela resolução dos procedimentos não interativos. As fases para a resolução destes problemas são:

- i. Aplica-se a lei fundamental da conservação para o volume de controle. A solução desta fase é alcançada integrando os volumes de controle no espaço em função das equações diferenciais parciais;
- ii. Para possuir vários termos das equações diferenciais se faz necessário transformar as equações algébricas;
- iii. Por fim, as equações algébricas são resolvidas iterativamente.

Com o decorrer da simulação resíduos são armazenados como uma medida da conservação global das características do escoamento e um arquivo com os resultados é criado e encaminhado para a próxima etapa.

2.2.4.4 Pós-processamento

O componente que avalia e gera os resultados iterativos é o pré-processador. O pós-processamento é responsável pela exposição das animações e valores específicos, ou seja, no pós-processamento tem-se a exibição da geometria e dos volumes de controle, além das imagens vetorizadas e os cálculos numéricos quantitativos.

2.2.5 Códigos Computacionais de CFD

Existem diversos simuladores de fluidodinâmica computacional, tais como os simuladores Fluent, CFX, PHOENICS, STAR-CD, KIVA, COMSOL e, os de código livre, OpenFOAM, FreeCFD, OpenFVM e OpenFlower. A escolha do simulador mais adequado depende do *hardware* oferecido para resolver os modelos e as equações que representa o problema. Nesse sentido, um programa de código livre é mais flexível, pois permite o acesso ao código fonte para modificações de acordo com a necessidade de cada nova estratégia de modelagem.

O OpenFOAM (*Field Operation and Manipulation*) se destaca entre os programas CFD pela excelência do código livre distribuído pela ESI e pela liberdade de implementação disponível em sua estrutura, ESI (2018). O OpenFOAM corresponde a um conjunto de bibliotecas, desenvolvidas em C++, para solução de problemas de campo e possui uma série de operações matemáticas já implementadas, tais como: cálculos tensoriais, diversas funções de interpolação, métodos de discretização temporal e solução de sistemas algébricos.

A discretização de equações diferenciais parciais (EDP) no OpenFOAM é baseada no método dos volumes finitos. As operações vetoriais, como por exemplo o divergente ou o laplaciano de uma variável de campo, podem ser discretizadas na sua forma implícita ou explícita. A discretização implícita de um operador vetorial forma um sistema de equações lineares que apresenta a discretização da EDP na malha, onde o sistema de equações formado precisa ser resolvido para determinar a solução da variável no campo no próximo instante de tempo.

No OpenFOAM, as operações são representadas através de uma estrutura de código que se assemelha à descrição matemática utilizada na modelagem do problema físico. Desta forma, é possível fazer uma correspondência entre a implementação e a equação original. Este conceito é alcançado por meio da programação orientada a objetos e da técnica de sobrecarregamento de operadores utilizados nas bibliotecas do OpenFOAM, que permite a simplificação na notação e encapsulamento dos detalhes dos procedimentos computacionais.

Os aplicativos do OpenFOAM podem ser classificados em duas grandes categorias: os *solvers* e os utilitários. Os *solvers* são os aplicativos desenvolvidos para resolver um problema específico da mecânica do contínuo. Os utilitários são aplicativos desenvolvidos para manipular dados como por exemplo o cálculo da magnitude de um

campo de velocidade. O OpenFOAM é distribuído já com uma série de *solvers* para solução de problemas típicos de simulação CFD. Assim o OpenFOAM mostra-se adequado para servir como base para o desenvolvimento de novas metodologias, por exemplo, a solução de um escoamento polidisperso, mostrado por Silva (2008) e Favero (2014), a solução de um escoamento de um fluido viscoelástico, apresentado por Farias (2014) e Favero (2009), ou ainda a solução de uma mistura multicomponente em meio poroso, de acordo com Novaresio (2012).

2.3 FUNDAMENTOS DO OPENFOAM

O OpenFOAM usa o método Lagrangeano discreto para simular os *sprays*. Um *spray* líquido é representado por uma ou várias parcelas diferentes, com cada parcela contendo um número de gotículas fisicamente idênticas, ou seja, possui o mesmo diâmetro, velocidade, pressão, temperatura, dentre outras características. Cada parcela é rastreada usando a abordagem Lagrangeana. Essas parcelas de gotículas trocam quantidade de movimento e calor com o gás ambiente, sendo afetadas pela dispersão turbulenta, colisão com outras gotículas, passagem pelo comprimento de quebra secundário, evaporação, etc.

A simulação desses processos requer o uso de uma série de modelos, incluindo: (a) um modelo de injeção líquida, (b) um modelo de quebra primária, (c) um modelo de influência do gás no movimento das gotículas, (d) um modelo de influência das gotículas no escoamento de gás turbulento, (e) um modelo de colisão de gotículas e coalescência, e (f) um modelo de quebra secundária.

O trabalho descrito nesta seção centrou-se exclusivamente na avaliação e comparação de vários novos modelos de injeção, quebra de gotículas primárias, quebra secundária e colisão, que foram implementadas no OpenFOAM; os modelos padrão para interação do movimento das gotículas, evaporação e outros processos foram utilizados em todas as simulações aqui discutidas.

2.3.1 Modelos da Injeção e da Quebra Primária

Nesses estudos, os valores tomados para uma série de parâmetros importantes são especificados com base em dados experimentais. Esses parâmetros incluem a posição e a área da abertura do injetor, a direção da injeção, a temperatura do combustível e

composição, massa total de combustível injetado (m) e pressão de injeção p_{inj} . Três métodos diferentes serão examinados para simular a quebra primária.

- Modelagem da Função de Densidade de Probabilidade Presumida

A abordagem mais simples para modelar a quebra primária envolve a geração de um número, Np , de parcelas diferentes na posição do injetor. Os raios das gotículas nas parcelas individuais são determinados usando uma Função de Densidade de Probabilidade adequada, PDF - *probability density function*. A função de densidade de probabilidade ajuda a identificar regiões de probabilidades superiores e inferiores para os valores de uma variável aleatória.

No OpenFOAM, a PDF de Rosin-Rammler é implementada para este fim. Os parâmetros de entrada neste caso são o número de parcelas (n_p), o raio de gotícula r_m , D o diâmetro das gotículas e δ uma constante para satisfazer a restrição de normalização.

$$f(D) = \frac{n}{\delta} \left(\frac{D}{\delta}\right)^{n-1} e^{-\frac{D^n}{\delta}} \quad (2.2)$$

Normalmente, a PDF é separada, ou seja, o intervalo de raios de gotícula (r) permitidos é restrito ($r_{min} < r < r_{max}$) com r_{max} sendo controlado pela escala de comprimento do bocal e o lado direito (RHS, *right hand side*) da Equação (2.2) é multiplicado por uma constante (Equação 2.3):

$$C(r_{min}, r_{max}) = \left\{ \exp \left[- \left(\frac{r_{min}}{r_m} \right)^q \right] - \exp \left[\left(- \frac{r_{max}}{r_m} \right)^q \right] \right\}^{-1} \quad (2.3)$$

para normalizar a expressão, tem-se a Equação 2.4:

$$\int_{r_{min}}^{r_{max}} C \frac{q \cdot r^{q-1}}{r_m^q} \exp \left[- \left(\frac{r}{r_m} \right)^q \right] dr = 1 \quad (2.4)$$

Usando este modelo simples de quebra primária, o valor absoluto w da velocidade de injeção pode ser calculado pela primeira resolução das Equações 2.5 e 2.6

$$W = \frac{\dot{m}}{C_d \rho_f A_i} \quad (2.5)$$

$$P_{inj} = P_{air} + \frac{\rho_f w^2}{2} \quad (2.6)$$

Em seguida, encontra-se uma taxa de vazão de massa estimada $\dot{m}(t)$ que satisfaça a restrição de conservação de massa, apresentada na Equação 2.7:

$$m = \int_0^{\infty} \dot{m}(t) dt \quad (2.7)$$

Finalmente, aperfeiçoando o coeficiente de descarga C_d na Equação (2.5) considere, A_i como a área do anel de fluido que sai do injetor, ρ_f a massa específica do combustível injetado e p_{air} a pressão do ar ambiente.

- Modelo *Wave* do *breakup* (comprimento de quebra)

O modelo de separação de ondas, *Wave*, proposto por Reitz e Bracco (1986) e Reitz (1987) para a simulação de jatos de combustível de alta pressão em motores é uma abordagem mais sofisticada para simular a quebra primária. Na estrutura do modelo, apenas uma parcela é produzida no bocal, com o diâmetro e o número de gotículas controladas pelo diâmetro do bocal e taxa de injeção em massa. Posteriormente, a quebra primária é simulada tratando a instabilidade de Kelvin-Helmholtz (KH) como a força motriz oriunda da separação das gotículas originais. Este modelo também é usado para simular a separação secundária de gotículas, quebra secundária, como será discutido na seção 2.3.2.

O modelo baseia-se nos resultados teóricos obtidos por Reitz e Bracco (1986). Esses pesquisadores consideraram uma superfície líquida cilíndrica sobre a qual um gás invíscido escoava com uma velocidade U e realizaram uma análise linear da estabilidade desta superfície em relação às perturbações da onda infinitesimal do raio do cilindro. A análise produziu uma relação de dispersão entre a taxa de crescimento (ω) da amplitude de

perturbação e seu número de onda k , com uma curva $\omega(k)$ com um único máximo positivo. Em um artigo subsequente, Reitz (1987) obteve uma aproximação numérica desses resultados teóricos e relatou as Equações 2.8 e 2.9.

$$\omega_{KH} = \frac{0,34+0,38We_g^{1,5}}{(1+Z)(1+1,4T^{0,6})} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_f r^3}} \quad (2.8)$$

$$\frac{\Lambda_{KH}}{r} = 9,02 \frac{(1+0,45Z^{0,5})(1+0,4T^{0,7})}{(1+0,87We_g^{1,67})^{0,6}} \quad (2.9)$$

Para a taxa de crescimento máxima ω_{KH} e o comprimento de onda correspondente $\Lambda_{KH}=2\pi/k_{max}$ uma função do raio de gotícula r , o número Weber $We_g = \rho g U^2 r / \sigma$ calculado para o gás e o número de Ohnesorge (número adimensional relacionado a atomização de líquidos) $Z \equiv \sqrt{(We_g)/Re_f}$ avaliado para o líquido combustível. Aqui, ρ é a massa específica (kg/m^3), σ é o coeficiente de tensão superficial (N/m) do combustível, $Re = Ur/\nu$ é o número de Reynolds, ν é a viscosidade cinemática do combustível, $T = Z\sqrt{We_g}$ é o número de Taylor e os subíndices g e f designam o gás e o combustível líquido, respectivamente. O rápido crescimento da onda de superfície foi a hipótese adotada pela quebra primária e posterior quebra secundária, REITZ (1987).

De acordo com as recomendações de Reitz e Diwakar (1986, 1987), a simulação da quebra primária no modelo de separação de onda começa com a injeção de gotículas esféricas cujo raio é igual ao da abertura do bocal, enquanto o número de gotículas é calculado com base na taxa de injeção de massa de combustível $\dot{m}(t)$. A taxa em que o raio da gota diminui devido à separação das ondas é então modelada usando a Equação 2.10.

$$\frac{dr}{dt} = - \frac{r-r_{KH}}{\tau_{KH}} \quad (2.10)$$

onde o tempo de relaxamento é parametrizado de acordo com a Equação 2.11:

$$\tau_{KH} = 3,726B_1 \frac{r}{\Omega_{KH}\Lambda_{KH}} \quad (2.11)$$

e o comprimento do raio das gotículas menores, cresce com o comprimento de onda da superfície, de crescimento mais rápido, isto é, se for menor do que o raio da gota original. Conforme observado na Equação 2.12

$$r_{KH} = B_0 \Lambda_{KH} \quad (2.12)$$

Se $B_0 \Lambda_{KH} > r$, então Reitz (1987) assumiu que o volume de uma gota de menor é igual a $\pi r^2 L$, onde $L = \min \{ \Lambda_{KH}, 2\pi U / \Omega_{KH} \}$, como representado pela Equação 2.13:

$$r_{KH} = \left[\frac{3r^2 \min \{ \Lambda_{KH}, 2\pi U / \Omega_{KH} \}}{4} \right]^{1/3} \quad (2.13)$$

Na maioria dos estudos que utilizam este modelo, o valor da constante B_0 é considerado 0,61, REITZ (1987), SU (1996), PATTERSON (1998) e BEALE (1999). No entanto, uma ampla gama de valores diferentes de B_1 foram examinados, variando de 10, REITZ (1987) PATTERSON (1998) a 30, SU (1996) ou 40 BEALE (1999). Esta grande variação nos valores ajustados da última constante é uma consequência das diferentes condições geradas pelos diferentes injetores considerados nestes estudos.

Dentro da estrutura do modelo KH, o raio de uma gota original diminui continuamente com o tempo de acordo com a Equação (2.9). Além disso, uma nova parcela de gotículas esféricas de raio r_{KH} é criada quando (i) a massa $4\pi N_0 \rho_f (r_0^3 - r^3)$ do líquido extraído das gotículas principais excede 3% da massa do pacote principal e (ii) a número de gotículas menores, avaliadas usando a lei de conservação de massa, excede o número de gotículas principais, REITZ (1987). O subíndice 0 indica o momento em que o pacote principal foi criado. Quando as gotículas menores são criadas, a temperatura e a velocidade iniciais na direção do vetor de velocidade da gota original são definidas de acordo com as características correspondentes da gota original. Além disso, as gotículas menores também recebem um vetor de velocidade aleatória na direção tangencial, REITZ (1987). Até que os critérios de quebra apresentados sejam satisfeitos, a conservação da massa é aplicada aumentando o número de gotículas no pacote principal ($Nr^3 = N_0 r_0^3$). Note-se que se $B_0 \Lambda_{KH} > r$, Reitz (1987) propôs (i) substituir o pacote principal por um novo pacote contendo

gotas com tamanho fornecido pela Equação (2.13) e (ii) realizar tal quebra apenas uma vez para cada pacote injetado.

Patterson e Reitz (1998) apontaram que o raio das gotículas principais também deve ser alterado durante um evento de quebra, a fim de garantir que o Raio Médio de Sauter (SMR- *Sauter mean radius*, ou seja, $\overline{r^3}/\overline{r^2}$) das gotículas principais e menores após a quebra permanece igual ao SMR das gotículas originais antes da separação. Usando essa restrição e a lei da conservação de massa, Patterson e Reitz (1998) derivaram as Equações 2.14 e 2.15

$$Nr^2(r - r_{KH}) = N_0r_b^2(r_b - r_{KH}) \quad (2.14)$$

$$n = \frac{Nr^3 - N_0r_b^3}{r_{KH}^3} \quad (2.15)$$

para calcular o número n de gotículas menores com raio r_{KH} e o raio r_b de gotículas médias. Neste caso, o subíndice b designa gotículas maiores formadas após a quebra, com o número de gotículas maiores sendo igual ao número N_0 de gotículas principais antes do processo de quebra. O modelo de onda apresenta apenas um parâmetro ajustável, ou seja, B_1 na Equação 2.11.

O OpenFOAM não usa as Equações (2.13), (2.14) e (2.15). Em vez disso, a quebra só é permitida se $B_0\Lambda_{KH} < r$; o segundo dos critérios de quebra anteriormente mencionados, isto é, $n \geq N_0$, não é solicitado. O raio das gotículas principais não é alterado durante o evento de separação, mas seu número diminui devido à redução da massa do pacote principal durante o evento de quebra. O número padrão n de gotículas menores é calculado com base que a massa é conservada. Quando uma gota menor é criada, sua temperatura e velocidade são ajustadas igual a temperatura e velocidade das gotículas principais. Antes da quebra é simulada uma diminuição no raio das gotículas principais, resolvendo a Equação 2.9 tem-se um esquema implícito, isto é, representado pela Equação 2.16.

$$r = \frac{r^0 + r_{KH} \frac{\Delta t}{\tau_{KH}}}{1 + \frac{\Delta t}{\tau_{KH}}} \quad (2.16)$$

onde r^0 é o raio da gota na etapa anterior $t - \Delta t$.

O modelo de quebra de onda implementado no OpenFOAM calcula a massa retirada de uma gota original como sendo igual a $(4\pi\rho_f r_{KH}^3)/3$ durante cada passo de tempo, com a restrição de que esta discreta massa não pode exceder a metade da massa da gota original .

No presente trabalho, as Equações (2.5) a (2.7) foram utilizadas para avaliar a velocidade de injeção no modelo de onda.

- Modelo LISA

O modelo de Quebra de Instabilidade Linearizada (LISA - *Linearized Instability Sheet Atomization*) foi desenvolvido por Reitz *et al.* (1999) e Schmidt(1999), com base em trabalhos anteriores de Dombrowski e Johns (1963) e Clark e Dombrowski(1972). Como o modelo de quebra de onda discutido anteriormente se concentra no crescimento de perturbações em uma superfície líquida devido à instabilidade KH como força motriz da quebra primária e associa a separação com as ondas de superfície que crescem mais rapidamente. No entanto, ao contrário do modelo de onda, que considera um volume de líquido cilíndrico, o modelo LISA trata da instabilidade de uma camada líquida plana de espessura $(2h)$. Portanto, os modelos Wave e LISA baseiam-se no mesmo mecanismo físico (a instabilidade KH), manifestando-se em duas configurações geométricas diferentes: um jato de líquido e um *spray* de cone oco, respectivamente.

Senecal *et al.* (1999) examinaram uma separação líquida, sobre a qual um gás viscoso está escoando com uma velocidade U . Uma análise linear da estabilidade da quebra em relação às perturbações da onda infinitesimal e da altura da superfície produziu complicadas relações de dispersão entre a taxa de crescimento da amplitude (ω) de perturbação e seu número de onda (k) para dois modos instáveis, um sinuoso e o outro variado. No primeiro caso, as ondas nas interfaces superior do gás-líquido estão exatamente em fase e a espessura da quebra é constante; no último, a espessura oscila porque a altura máxima da interface superior corresponde à altura mínima da interface inferior e vice-versa. A investigação numérica das relações de dispersão simplificadas, obtidas através da análise dessas relações gerais, no caso limitante de um gás invíscido, mostrou que cada curva $\omega(k)$ tem um único pico, sendo a taxa de crescimento máxima do modo sinuoso maior (quando

calculado o número de Weber, $We_g = \rho_g U^2 r / \sigma$, do gás é baixo) ou igual (quando We_g é grande) para a taxa de crescimento máxima do modo variável. Com base nessa observação, o modelo LISA se concentra exclusivamente no modo sinuoso.

Posteriormente, Senecal *et al.* (1999) analisaram a relação de dispersão para o modo sinuoso (novamente no limite de gás invíscido) em casos envolvendo ondas longas ($kh \ll 1$) e curtas ($kh \gg 1$). Os resultados numéricos relatados no documento citado indicam que a relação de dispersão simplificada obtida para ondas longas fornece uma aproximação razoável da relação de dispersão mais rigorosa (válida para todos kh , mas $v_g = 0$) no caso de um baixo número de We_g . Além disso, as expressões teóricas derivadas para o caso limitante de $v_g = 0$ e $\rho_g \ll \rho_f$ mostram que (i) a proporção das taxas de crescimento das ondas curtas e longas em escala como \sqrt{kh} , ou seja, as ondas curtas crescem mais rápido do que as ondas longas se $kh > 1$, e (ii) as taxas máximas de crescimento para ondas longas e curtas são iguais entre si se $We_g = 27/16$.

Finalmente, a investigação numérica da relação de dispersão geral ($v_g > 0$, arbitrária) indicou que a simplificação de $v_g = 0$ foi justificada para as ondas longas, enquanto o crescimento das ondas curtas foi substancialmente afetado pela viscosidade do gás.

Com base nos resultados teóricos apresentados, alguns pesquisadores propuseram o seguinte modelo de quebra.

1º) a quebra ocorre quando a amplitude da onda de crescimento mais rápida atinge um valor crítico η_b .

2º) se $We_g > 27/16$, a taxa de crescimento mais rápida é calculada usando a relação de dispersão, representada pela Equação 2.17, derivado para as ondas curtas.

$$w = -2v_g k^2 + \sqrt{4v_g^2 k^4 + QU^2 k^2} - \frac{\sigma k^3}{\rho_f} \quad (2.17)$$

Onde, $Q = \rho_g / \rho_f$. Como ω não depende da espessura da dispersão, o crescimento da amplitude de perturbação é modelado no limite linear, conforme Equação 2.18

$$\eta(t) = \eta_0 \exp(\Omega_s t) \quad (2.18)$$

Onde, Ω_s é a taxa de crescimento máxima para as ondas curtas, calculado usando a Equação 2.16. Consequentemente, o tempo de separação e as escalas de comprimento são representadas pelas Equações 2.19 e 2.20.

$$\tau_s = \frac{1}{\Omega_s} \ln \left(\frac{\eta_b}{\eta_0} \right) \quad (2.19)$$

e

$$L_s = \frac{V}{\Omega_s} \ln \left(\frac{\eta_b}{\eta_0} \right) \quad (2.20)$$

Respectivamente, sendo $\ln (\eta_b/\eta_0)$ igual a 12, SENEAL(1999) e SCHMIDT (1999). Aqui, V é a magnitude da velocidade da dispersão líquida, enquanto U é a magnitude da velocidade da dispersão em relação ao gás circundante. Schmidt et al. (1999) apontou que $V \approx U$, porque a velocidade da dispersão é muito maior do que a velocidade do gás na proximidade de um injetor de cone oco.

Se $We_g < 27/16$, a taxa de crescimento mais rápida é calculada a partir da relação de dispersão representada pela Equação 2.21

$$w = \sqrt{\frac{QU^2k}{h} - \frac{\sigma k^2}{\rho_f h}} \quad (2.21)$$

Derivado para ondas longas e gás invíscido. A taxa máxima de crescimento é dada pela Equação 2.22

$$\Omega_l = \frac{\rho_g U}{\sqrt[2]{\rho_f \sigma h}} \quad (2.22)$$

é alcançado para a Equação 2.23

$$K_l = \frac{\rho_g U^2}{2\sigma} \quad (2.23)$$

Como a taxa de crescimento máximo das ondas longas depende da espessura da dispersão, que diminui com a distância X entre a dispersão e o injetor devido à conservação

da massa ($Rh = R_0h_0$), onde $R = R_0 + \cos\theta$, e θ é o ângulo do cone, a Equação 2.18 deve ser substituída pela Equação 2.24.

$$\ln\left(\frac{\eta_b}{\eta_0}\right) = \int_0^t \Omega_l d\vartheta \quad (2.24)$$

Para as ondas longas. Senecal *et al.* (1999) assumiram que $h = J/t$, onde J é uma constante dimensional (se $X = Vt \gg R_0$, então $J = R_0h_0/V \cos\theta$). Neste caso, as Equações 2.22 e 2.24 produzem a Equação 2.25

$$L_l = V\tau_l = V \left[3 \ln\left(\frac{\eta_b}{\eta_0}\right) \right]^{2/3} \left(\frac{\rho_f \sigma J}{\rho_g^2 U^4} \right)^{1/3} \quad (2.25)$$

3º) assim que a distância X movida pela dispersão líquida exceder L_s (se $We_g > 27/16$) ou L_l (se $We_g < 27/16$), a dispersão quebra e forma ligamentos (volumes cilíndricos alongados cujo eixo de simetria é perpendicular à direção do movimento da dispersão). O diâmetro d_L dos ligamentos é calculado com base no pressuposto de que a massa é conservada e que os ligamentos são formados uma vez por comprimento de onda curto, mas duas vezes por comprimento de onda longo. Portanto, se $We_g > 27/16$, tem-se a Equação 2.26

$$d_L = \sqrt{\frac{16h}{K_s}} \quad (2.26)$$

onde K_s está associado ao máximo de uma curva $\omega(k)$, calculada usando a Equação 2.17. Se $We_g < 27/16$, tem-se a Equação 2.27

$$d_L = \sqrt{\frac{8h}{K_l}} \quad (2.27)$$

onde K_l é calculado usando a Equação 2.23. A espessura $2h$ da dispersão líquida nas Equações 2.26 e 2.27 pode ser avaliada de acordo com a Equação 2.28

$$\dot{m}_{inj}(t - \tau) = 4\pi\rho_f R h U \quad (2.28)$$

onde $\dot{m}_{inj}(t - \tau)$ é a vazão mássica de combustível injetado $\tau = X/V$ segundos antes da separação.

4º) seguindo Dombrowski e Johns (1963), Reitz *et al.* (1999) e Schmidt(1999) assumiram que a separação dos ligamentos é controlada pela instabilidade de uma coluna líquida cilíndrica e viscosa em um gás quiescente (observe que a velocidade do escoamento ao longo dos ligamentos é baixa, porque eles estão orientados transversalmente à direção do movimento da dispersão), e que a separação do ligamento ocorre quando a amplitude da onda de crescimento mais rápido é igual ao raio do ligamento. Consequentemente, o raio da gota menor é calculado a partir de um balanço de massa representado pela Equação 2.29.

$$r^3 = \frac{3\pi d_L^2}{8k_W} \quad (2.29)$$

Onde o número de Wave é dado pela Equação 2.30

$$K_W d_L = \left(\frac{1}{2} + \frac{3\rho_f v_f}{2\sqrt{\rho_f \sigma d_l}} \right)^{-1/2} \quad (2.30)$$

a onda de crescimento mais rápida é calculada de acordo com a solução clássica proposta por Weber (1931).

5º) a escala de tempo da separação do ligamento é considerada muito mais curta do que a escala de tempo da separação da dispersão; nas aplicações de modelagem, presume-se que as gotículas esféricas são formadas diretamente da dispersão líquida, e nenhuma tentativa é feita para simular os ligamentos.

6º) durante o evento de separação, o raio das gotículas menores é selecionado aleatoriamente usando uma distribuição de Rosin-Rammler, com o raio médio de acordo com Senecal (1999) ou o SMD de acordo com Schmidt (1999) sendo avaliado o uso da Equação 2.29.

7º) os modelos de interação entre a camada líquida e o gás, as colisões e a quebra secundária são desligadas em simulações até o evento de quebra, SCHMIDT (1999).

Finalmente, Reitz (1999) e Schmidt (1999) propuseram o uso das Equações 2.31 e 2.32 para avaliar a velocidade de injeção para uma dispersão líquida.

$$w = k_w \sqrt{\frac{2(p_{inj}-p_a)}{\rho_f}} \quad (2.31)$$

$$k_w = \min \left\{ 1, \max \left[0,7, \frac{\dot{m}}{\rho_f A_i \cos \theta} \sqrt{\frac{\rho_f}{2(p_{inj}-p_a)}} \right] \right\} \quad (2.32)$$

O modelo LISA foi utilizado com sucesso (em conjunto com o chamado modelo TAB de separação secundária, que é discutido na seção 2.3.2) por Reitz et al. Senecal(1999) e Schmidt (1999) para simular o comprimento de penetração e SMD para atomizadores de cone oco injetados a pressões variando de 4,76 a 10 MPa. Chryssakis (2003) et al. e Gao (2005) et al. também usaram o modelo LISA-TAB para prever o comprimento de penetração e SMD para pulverizadores ocos de gasolina descarregados por diferentes injetores de vórtice a 5 MPa. Park *et al.* (2009) usaram o modelo LISA-TAB para prever SMD para pulverizações de gasolina e bioetanol descarregadas por um injetor de vórtice a 7MPa.

Para permitir o efeito de amortecimento de um gás mais denso sobre o crescimento das ondas de superfície e a influência do superaquecimento das gotículas de combustível em sua separação, o OpenFOAM incorpora uma extensão empírica da Equação 2.28, representada pela Equação 2.33. LUCCHINI (2005).

$$r^3 = \frac{3\pi d_L^2}{8K_w} \left(\frac{p}{p_{atm}} \right)^{0,27} \left[1 - x \left(\frac{p}{p_{atm}} \right)^{-0,135} \right] \quad (2.33)$$

do tipo proposto por Zuo (2000). Sendo que p_{atm} é a pressão atmosférica, tem-se a Equação 2.34.

$$X = \frac{I(T_f) - I(T_b)}{L(T_b)} \quad (2.34)$$

X é o parâmetro de superaquecimento, I e L são a energia interna da partícula líquida e o calor latente do líquido, respectivamente, e T_b é a temperatura de ebulição local.

Lucchini (2005) usou o OpenFOAM para prever o comprimento de penetração e SMD para quatro diferentes injetores de cone oco descarregados por injetores de vórtice sob pressões de injeção variando de 4,76 a 7MPa. Nessas simulações, o modelo LISA de quebra primária foi combinado com o modelo Reitz-KHRT da quebra secundária.

2.3.2 Modelos da Quebra Secundária

Os modelos da segunda quebra são projetados para simular a formação de gotículas menores na parte a jusante de um *spray*. Este processo é causado principalmente por forças aerodinâmicas que atuam sobre gotículas do gás circundante. Esta seção apresenta três modelos para a segunda quebra, os quais são implementados no OpenFOAM com os nomes de Reitz-Diwakar, Taylor Analogue Breakup (TAB) e Kelvin-Helmholtz, Rayleigh-Taylor (KHRT).

- O modelo Reitz-Diwakar

Reitz e Diwakar (1987) reduziram o problema da quebra secundária em um processo envolvendo uma diminuição contínua dos raios de gotícula, usando na simulação a Equação 2.35.

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{r - r_{RD}}{\tau_{RD}} \quad (2.35)$$

as correlações empíricas utilizadas são apresentadas nas Equações 2.36 e 2.37, REITZ e DIWAKAR (1986).

$$\tau_{RD} = B_{RD} \frac{r}{U} \sqrt{\frac{\rho_f}{\rho_g}} \quad (2.36)$$

$$r_{RD} = \frac{\sigma^2}{2\rho_g U^3 \nu_g} \quad (2.37)$$

se $We_g > 0,5\sqrt{Re_g}$, tem-se as Equações 2.38 e 2.39

$$\tau_{RD} = \pi \sqrt{\frac{\rho_f r^3}{2\sigma}} \quad (2.38)$$

$$r_{RD} = \frac{6\sigma}{\rho_g U^2} \quad (2.39)$$

se $6 < We_g < 0,5\sqrt{Re_g}$. O raio da gota é assumido como constante se $We_g < 6$. Onde, $We_g = \rho_g U^2 r / \sigma$ e $Re_g = Ur / \nu_g$ são os números Weber e Reynolds, respectivamente, ambos calculados para o gás. ρ é a massa específica e σ é o coeficiente de tensão superficial do combustível, ν é a viscosidade cinemática, U é a magnitude do vetor de velocidade do gás em relação à gota e os subscritos g e f designam o gás e o combustível líquido, respectivamente. O valor padrão da constante B_{RD} é 20 segundo Reitz e Diwakar (1986). O número N de gotículas menores é calculado assumindo que a massa das gotículas na parcela é conservada, isto é, $Nr^3 = N_0 r_0^3$.

Cabe ressaltar que a grandeza dada pelas Equações (2.36) e (2.38) é semelhante à prevista pelo modelo KH para o tempo de quebra, segundo Reitz (1987). Na verdade, no limite invisível, temos $Z = 0$, $T = 0$, enquanto a Equação (2.8) e (2.9) dão $\Lambda_{KH} \rightarrow 9,02$ e $\Omega_{KH} \sqrt{\rho_f r^3 / \sigma} \rightarrow 0,34$ se $We_g \rightarrow 0$, enquanto $\Lambda_{KH} \rightarrow 9,806 / We_g$ e $\Omega_{KH} \sqrt{\rho_f r^3 / \sigma} \rightarrow 0,38 We_g^{1,5}$ se $We_g \rightarrow \infty$.

Consequentemente, a Equação 2.11 produz a Equação 2.40.

$$\tau_{RD} = 1,72 B_1 \sqrt{\frac{\rho_f r^3}{2\sigma}} \quad (2.40)$$

se $We_g \rightarrow \infty$ tem-se a Equação 2.41

$$\tau_{RD} = 1,72B_1 \sqrt{\frac{\rho_f r}{\rho_g U}} \quad (2.41)$$

se $We_g \rightarrow \infty$. A equação 2.40 se reduz à Equação (2.38) se $1,72B_1 = \pi$, enquanto a Equação 2.41 se reduz à Equação 2.38 se $B_1 = B_{RD}$. Além disso, se $Z_0, T = 0$ e $We_g \rightarrow \infty$, a Equação 2.12 resulta em $We_g = 6$, novamente convergindo com o modelo Reitz-Diwakar.

No OpenFOAM, a Equação 2.35 é resolvida usando um esquema implícito, onde tem-se a Equação 2.42.

$$r = \frac{r^0 + r_{KH} \frac{\Delta t}{\tau_{RD}}}{1 + \frac{\Delta t}{\tau_{RD}}} \quad (2.42)$$

onde r^0 é o raio da gota na etapa anterior de $t - \Delta t$.

- O modelo TAB

O modelo TAB desenvolvido por O'Rourke e Amsden (1987) trata a quebra como consequência de oscilações na forma de uma gota, causada por forças aerodinâmicas. Enquanto a forma de equilíbrio da superfície de gotícula é esférica, torna-se elipsoidal e oscila sob a influência de forças aerodinâmicas e tensão superficial. O modelo considera a oscilação da coordenada normalizada $y = x/2r$ do ponto na superfície de gotícula que está mais a montante. Este é o polo ocidental da superfície de gotículas, desde que a velocidade do gás em relação à gota seja direcionada ao longo da direção x e é positiva. A dissolução é postulada para ocorrer se $|y| = 1$.

O'Rourke e Amsden (1987) modelaram essas oscilações considerando a Equação 2.43.

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = 2C_F \frac{\rho_g U^2}{\rho_f r^2} - \frac{C_k \sigma}{\rho_f r^3} y - \frac{C_d v_f}{r^2} \frac{dy}{dt} \quad (2.43)$$

em que os três termos do modelo do lado direito, respectivamente, (i) forças aerodinâmicas, que atuam para aumentar y e causar as oscilações, (ii) tensão superficial, que neutraliza as forças aerodinâmicas e atua para restaurar a esférica forma da superfície de queda, e (iii) forças viscosas, que amortece as oscilações. No caso das forças viscosas

insignificantes, a Equação 2.43 é matematicamente semelhante à bem conhecida equação $\ddot{x} = F - kx$, que descreve o oscilador harmônico. Essa analogia entre a gota e o oscilador harmônico foi sugerida por Taylor. Consequentemente O'Rourke e Amsden em 1987, nomearam seu modelo como o modelo Taylor Analogue Breakup (TAB).

A equação 2.42 envolve três constantes, C_F , C_k e C_d . Duas delas, $C_k = 8$ e $C_d = 5$ foram determinadas por O'Rourke e Amsden (1987), comparando a produção do modelo com as soluções teóricas conhecidas. A terceira constante, $C_F = 1/3$, foi avaliada em comparação com dados experimentais, o que mostrou que uma quebra poderia ocorrer se $We_g > 6$. Note que o mesmo critério empírico é invocado no modelo Reitz e Diwakar (1986) (1987).

Se a velocidade relativa U da gota em relação ao gás for assumida como sendo constante, a solução para Equação 2.43 é a Equação 2.44

$$y(t) = \frac{We_g}{12} + \left\{ \left(y_0 - \frac{We_g}{12} \right) \cos \omega t + \frac{1}{\omega} \left[\dot{y}_0 + \frac{1}{t_d} \left(y_0 - \frac{We_g}{12} \right) \right] \sin \omega t \right\} \exp \left(-\frac{t}{t_d} \right) \quad (2.44)$$

para $y_0 \equiv y(0)$, $\dot{y}_0 \equiv dy/dt(0)$, tem-se as Equações 2.45 e 2.46:

$$\frac{1}{t_d} = \frac{5 v_f}{2 r^2} \quad (2.45)$$

$$\omega^2 = \frac{8\sigma}{\rho_f r^3} - \frac{1}{t_d^2} \quad (2.46)$$

e os valores acima das constantes do modelo são usados.

Em contraste com as ondas instáveis de amplitude crescente abordadas pelos modelos Reitz-KHRT e LISA, o modelo TAB lida com oscilações que se deterioram devido a forças viscosas, simuladas pelo último termo exponencial da Equação (2.44). No entanto, certas mudanças previstas pelo modelo TAB se assemelham às associadas ao modelo KH. Por exemplo, se as forças viscosas são negligenciadas e $y_0 = \dot{y}_0 = 0$, então a Equação 2.44 torna-se a Equação 2.47:

$$y(t) = \frac{We_g}{12} (1 - \cos \omega t) \quad (2.47)$$

Na ocorrência da quebra instantânea, que é caracterizada por $y = 1$, a Equação 2.47 torna-se a Equação 2.48.

$$1 = \frac{We_g}{24} (\omega t_b)^2 \quad (2.48)$$

se $We_g \gg 1$. Posteriormente, a Equação 2.46 e 2.48 resultam na Equação 2.49

$$t_b = \sqrt{3} \sqrt{\frac{\rho_f r}{\rho_g U}} \quad (2.49)$$

que é basicamente semelhante às Equações 2.38 e 2.40, mas envolve uma constante significativamente menor. Se $We_g \approx 6$, a Equação 2.47 irá prever uma quebra somente se $\omega t \approx \pi$. Consequentemente, usando a Equação 2.46, tem-se a Equação 2.50.

$$t_b = \frac{\pi}{\omega} = \pi \sqrt{\frac{\rho_f r^3}{8\sigma}} \quad (2.50)$$

que é basicamente semelhante às Equações (2.38) e (2.40), mas envolve uma constante menor.

O'Rourke e Amsden(1987) propuseram que a coordenada normalizada y ($t_n + 1$) em ($n + 1$)-th, o passo de tempo poderia ser calculado usando a Equação 2.44, com $y_0 = y_n \equiv y(t_n)$ e $\dot{y}_0 = \dot{y}_n \equiv dy/dt (t_{n+1})$. Se a amplitude é dada pela Equação 2.51

$$A^2 = \left(y_n - \frac{We_g}{12} \right)^2 + \left(\frac{\dot{y}_n}{\omega} \right)^2 \quad (2.51)$$

de uma oscilação não amortecida [isto é $t_d \rightarrow \infty$ na Equação (2.44)] é baixa, isto é, mostrado na Equação 2.52

$$\frac{We_g}{12} + A \leq 1 \quad (2.52)$$

então a quebra não pode ocorrer durante o intervalo de tempo $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ e o próximo passo de tempo (t_{n+2}) é considerado, com y_{n+1} e \dot{y}_{n+1} sendo calculados usando a Equação 2.44.

Se a Equação 2.52 não for utilizada, então utiliza-se a Equação 2.53

$$1 = \frac{We_g}{12} + A \cos[\omega(t - t_n) + \emptyset] \quad (2.53)$$

que resulta da Equação 2.44 desde que $t_d \rightarrow \infty$ e $y = 1$, seja resolvida para avaliar a menor raiz t_{bu} maior do que t_n . Onde tem-se as Equações 2.54 e 2.55

$$\cos \emptyset = \frac{1}{A} \left(y_n - \frac{We_g}{12} \right) \quad (2.54)$$

e

$$\sin \emptyset = -\frac{\dot{y}_n}{A\omega} \quad (2.55)$$

Se $t_{bu} > t_{n+1}$, então a quebra não pode ocorrer durante o intervalo de tempo $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ e o próximo passo de tempo (t_{n+2}) é considerado, com y_{n+1} e \dot{y}_{n+1} sendo calculado usando a Equação (2.44). Se $t_{bu} < t_{n+1}$, então a gota se rompe e o raio da gota menor é gerado aleatoriamente usando a Equação 2.56 que é da distribuição da massa de gotícula

$$g(r) = \frac{r^3}{6r_m^4} \exp\left(-\frac{r}{r_m}\right) \quad (2.56)$$

Com o raio médio de Sauter r_{32} , tem-se a Equação 2.57

$$\frac{r}{r_{32}} = 1 + \frac{8K}{20} + \left(\frac{6K-5}{120}\right) \frac{\rho_f r^3}{\sigma} \dot{y}(t_{bu}) \quad (2.57)$$

sendo determinado usando o balanço energético, de acordo com O'Rourke e Amsden (1987), e $r_m = r_{32}/6 = \bar{r}^4$. Aqui, $K = 10/3$ é uma constante e r_n é o raio da gota original no passo de tempo t_n .

O número de gotículas menor tem-se a Equação 2.58

$$N_{n+1} = N_n \left(\frac{r_n}{r_{n+1}} \right)^3 \quad (2.58)$$

é calculado assumindo a conservação da massa.

Finalmente, as gotículas menores são assumidas para adquirir uma velocidade normal a trajetória da queda das gotículas maiores durante o evento de quebra. O'Rourke e Amsden(1987) assumiram que essa velocidade normal é igual a $x(t_{bu}) = 0,5r\dot{\gamma}(t_{bu})$, que é calculada no momento da separação t_{bu} usando a Equação 2.44.

Como mencionado, o modelo TAB para quebra secundária foi usado com sucesso em conjunto com o modelo LISA de quebra primária por vários grupos de pesquisa interessados em simular o comprimento de penetração e/ou Diâmetro Médio de Sauter, SMD, de pulverizadores de cone oco injetados a pressões variando de 4,76 a 10Mpa, de acordo com Senecal (1999), Schmidt (1999), Chryssakis (2003) e Gao (2005). Em alguns desses trabalhos, seguindo uma proposta de Han *et al.* (1997), a distribuição χ -quadrado dada pela Equação (2.56) foi substituída pela distribuição de Rosin-Rammler

$$f(r) = \frac{qr^{q-1}}{r_m^q} \exp \left[- \left(\frac{r}{r_m} \right)^q \right] \quad (2.59)$$

Para uma Função de Densidade de Probabilidade, PDF, fornecida pela Equação 2.59, tem-se a Equação 2.60

$$r_{32} \equiv \frac{\overline{r^3}}{r^2} = \frac{3}{2} \frac{\Gamma(3/q)}{\Gamma(2/q)} r_m = \frac{3}{2} \frac{q\Gamma(3/q)}{\Gamma(1/q)\Gamma^2/q} \bar{r} \quad (2.60)$$

onde Γ é a função gama. Por exemplo, se $q = 2$, então $r_{32} = 0.75\sqrt{\pi\bar{r}}$. Observe que o raio médio é igual a $q^{-1}\Gamma(q^{-1})r_m$.

A distribuição de Rosin-Rammler é usada no OpenFOAM.

- O modelo Reitz-KHRT

O modelo Reitz-KHRT trata a quebra de gotículas como consequência do crescimento de duas instabilidades: a instabilidade de KH abordada pelo modelo de onda, que já foi discutido, e a instabilidade de Rayleigh-Taylor (RT) que se desenvolve na superfície das gotículas sob a influência da aceleração do escoamento. As duas instabilidades são assumidas como independentes e competitivas entre si. Conceitualmente, os submodelos das duas instabilidades são semelhantes, ou seja, a quebra está associada à perturbação de crescimento mais rápido e o raio da gota menor está associado ao comprimento de onda dessa perturbação. Como o submodelo KH é idêntico ao modelo de onda já discutido acima, o restante desta seção se concentra exclusivamente no submodelo RT desenvolvido por Su(1996), Patterson (1998) e Beale e Reitz (1999). Este modelo é baseado nos resultados teóricos de Bellman e Pennington(1954) que fizeram uma análise linear da evolução de uma pequena perturbação em uma interface plana entre dois fluidos visíveis e incompressíveis de profundidade infinita, sendo os fluidos acelerados em uma direção perpendicular à interface.

Para a limitação em que as viscosidades dos fluidos são insignificantes, Bellman e Pennington(1954) obtiveram a Equação 2.61 para o número de ondas

$$K = \sqrt{\frac{-a(\rho_f - \rho_g)}{3\sigma}} \quad (2.61)$$

e a taxa de crescimento é dada pela Equação 2.62

$$\Omega_{RT} = \sqrt{\frac{2}{3\sqrt{3}\sigma} \frac{[-a(\rho_f - \rho_g)]^{3/2}}{\rho_f - \rho_g}} \quad (2.62)$$

da perturbação mais instável. Onde, a é a aceleração direcionada de um líquido menos denso para um fluido mais denso. Para que a interface seja instável, essa aceleração deve ser negativa (apontar para o fluido menos denso).

Patterson e Reitz(1998) associaram a aceleração a com a força de arrasto. Para a borda de arrasto de uma gotícula, esta aceleração é negativa, conforme Equação 2.63.

$$a = -\frac{3}{8} C_D \frac{\rho_g U^2}{\rho_g r} \quad (2.63)$$

enquanto uma expressão diferente foi usada por Su *et al.* (1996).

Reitz *et al.* (Su (1996), Patterson (1998) e Beale e Reitz (1999)) hipotetizaram que a instabilidade da RT cresceria e causaria dissolução das gotículas após um período, de acordo com a Equação 2.64.

$$\tau_{RT} = \frac{C_\tau}{\Omega_{RT}} \quad (2.64)$$

apenas se o comprimento da perturbação de crescimento mais rápido for menor do que o diâmetro das gotículas, isto é, representado pela Equação 2.65.

$$2r > \Lambda_{RT} = \frac{2\pi C_{RT}}{K_{RT}} \quad (2.65)$$

Valores diferentes das constantes de ajuste C_τ e C_{RT} foram relatados em diferentes trabalhos. Para *sprays* de cone oco, Beale e Reitz (1999) usaram $C_\tau = 10$ e $C_{RT} = 0,1$.

Diferentes métodos foram propostos para simular os raios das gotículas menores de cone oco, Su (1996), Patterson (1998) e Beale e Reitz (1999). A distribuição de Rosin-Rammler com o raio médio igual a r_{RT} e $q = 10$ foi invocada por Beale e Reitz (1999) para simular a penetração e SMD de pulverizadores de cone oco injetados sob pressões de 3,4 para 6,12 MPa.

Nas últimas simulações, o modelo RT foi desabilitado até que a distância percorrida por uma parcela excedesse um comprimento de quebra primária avaliado de acordo com a Equação 2.66.

$$L_{CD} = B \left(\frac{\rho_f \sigma h \cos \theta}{\rho_f^2 U^2} \right)^{1/2} \quad (2.66)$$

onde $B = 10,4$. A Equação (2.66) modela a quebra de uma camada líquida sob a influência das ondas de superfície longa de crescimento mais rápido, um fenômeno que também é

abordado pelo modelo LISA; é instrutivo comparar a Equação 2.66 com a Equação 2.25 onde $J \propto hL_t/U$.

Assim, para um *spray* de cone oco, o modelo Reitz-KHRT envolve quatro constantes de sintonia; B_1 na Equação (2.11), C_τ , C_{RT} e B .

No OpenFOAM, seguindo a proposta de Su *et al.* (1996), o número n_c e o raio r_c das gotículas menores são calculados de acordo com as Equações 2.67 e 2.68.

$$n_c = N \frac{r_{KRT}}{\pi} \quad (2.67)$$

$$n_c r_c^3 = N r^3 \quad (2.68)$$

Segundo Liu(1993) o coeficiente de arrasto, C_D , é avaliado para uma gota não esférica invocando a Equação 2.69.

$$C_D = C_{D,esférico} (1 + B_D \gamma) \quad (2.69)$$

onde $C_{D,esférico}$ é o coeficiente de arrasto para uma gotícula esférica, B_D é uma constante, e o modelo TAB é utilizado para avaliar o desvio normalizado γ da forma da gota de uma esfera, isto é, γ é calculado usando a Equação (2.44). Na sequência de uma proposta de Patterson e Reitz (1998), os critérios de separação de RT são verificados primeiro e a separação de KH é considerada apenas se esses critérios não forem satisfeitos.

- O modelo de *spray* VSB2

O modelo de *spray* VSB2, que foi implementado no OpenFOAM por Kösters e Karlsson (2011), é um modelo de escoamento separado estocástico (SSF - *stochastic separate flow*) em que as equações lagrangeanas da posição de queda, quantidade de movimento, massa e energia são resolvidas. As principais diferenças entre este modelo e o SSF tradicionais são que o pacote contendo gotas idênticas é substituído por um nódulo irregular de líquido, referido como uma partícula, que transporta gotas de vários tamanhos. A vantagem deste modelo de atomização é que ele tem relativamente poucas constantes de ajustes. O modelo de *spray* VSB2 foi usado com sucesso para prever o comportamento de

sprays a diesel sob várias pressões ambientais e pressões de injeção de acordo com Kösters e Karlsson (2011).

2.3.3 Modelos de Colisão

No OpenFOAM existem dois modelos de colisão, o modelo de O'Rourke e Nordin. O clássico modelo O'Rourke [Amsden (1989), O'rourke (1981) e O'rourke e Bracco (1980)] é amplamente utilizado em simulações de atomização de motores e através deste modelo Nordin (2001) desenvolveu um novo modelo de trajetória. O modelo de colisão de O'Rourke afirma que a probabilidade de uma colisão entre uma gota maior do pacote i e n_j as gotículas menores e idênticas do pacote j é descrita por uma distribuição de Poisson, conforme a Equação 2.70.

$$P_{n_j} = \frac{(v\Delta t)^{n_j}}{n_j!} e^{-v\Delta t} \quad (2.70)$$

desde que as duas parcelas ocupem a mesma célula computacional (caso contrário, a probabilidade de colisão é zero). Assim sendo, tem-se a Equação 2.71

$$v = N_j \frac{\pi(r_i+r_j)^2}{V_{ij}} |\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j| \quad (2.71)$$

i é a frequência de colisão para uma única gota do pacote, N_j é o número de gotículas na parcela j , V_{ij} é o volume da célula ocupada por ambas as parcelas e \mathbf{u}_i é o vetor de velocidade do pacote da série.

Posteriormente, se um número aleatório b uniformemente distribuído entre zero e a unidade for menor do que o representado na Equação 2.72

$$b_{cr} = \min \left\{ 1,0 \frac{2,4}{We_j} \left[\left(\frac{r_i}{r_j} \right)^3 - 2,4 \left(\frac{r_i}{r_j} \right)^2 + 2,7 \frac{r_i}{r_j} \right] \right\} \quad (2.72)$$

as gotículas colidindo são assumidas como coalescentes, com a temperatura, a velocidade e o raio da grande gota formada por esta coalescência sendo avaliada de acordo com a Equação 2.73.

$$T = \frac{T_i r_i^3 + T_j n_j r_j^3}{r_i^3 + n_j r_j^3},$$

$$\mathbf{u} = \frac{u_i r_i^3 + u_j n_j r_j^3}{r_i^3 + n_j r_j^3}, \quad (2.73)$$

$$r^3 = r_i^3 + n_j r_j^3$$

Desta maneira, o número Weber é dado pela Equação 2.74.

$$We_j = \frac{\rho_f |\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j| r_j}{\sigma(\bar{T}_V)} \quad (2.74)$$

é calculado para as j -th (menores) gotas colidindo, com a tensão superficial sendo avaliada na temperatura do volume médio, dado pela Equação 2.75

$$\bar{T}_V = \frac{T_i r_i^3 + T_j r_j^3}{r_i^3 + r_j^3} \quad (2.75)$$

se o número aleatório b for maior do que b_{cr} , as gotículas que não colidem, se colidem e trocam impulso uma com a outra, isto é, de acordo com a Equação 2.76.

$$\mathbf{u}'_k = \mathbf{V}_k,$$

$$\mathbf{u}'_l = \frac{N_k \mathbf{V}_l + (N_l - N_k) \mathbf{u}_l}{N_l} \quad (2.76)$$

após a colisão. Tem-se, a Equação 2.77.

$$\mathbf{V}_k = \frac{\mathbf{u}_i r_i^3 + \mathbf{u}_j r_j^3 + \xi (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) r_j^3}{r_i^3 + r_j^3}$$

$$V_l = \frac{\mathbf{u}_i r_i^3 + \mathbf{u}_j r_j^3 - \xi(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) r_i^3}{r_i^3 + r_j^3} \quad (2.77)$$

$k=i$ e $l=j$ se $N_i \leq N_j$, mas $k=j$ e $l=i$ se $N_i > N_j$, e tem-se a Equação 2.78.

$$\xi = \frac{\sqrt{b} - \sqrt{b_{cr}}}{1 - \sqrt{b_{cr}}} \quad (2.78)$$

Os leitores que procuram uma justificativa mais rigorosa para as Equações 2.70 a 2.78 são convidados a percorrer a Tese de O'Rourke (1981).

2.3.4 Modelo de Trajetória

Dentro do quadro do modelo de trajetória proposto por Nordin (2001), as gotículas de pacotes i -th e j -th podem colidir mesmo que ocupem células diferentes em um instante, dado t_n , mas (i) estão se movendo um para o outro, ou seja, de acordo com a Equação 2.79.

$$U_{ij} = [\mathbf{u}_i(t_n) - \mathbf{u}_j(t_n)] \cdot \frac{\mathbf{X}_j(t_n) - \mathbf{X}_i(t_n)}{|\mathbf{X}_i(t_n) - \mathbf{X}_j(t_n)|} > 0 \quad (2.79)$$

e (ii) passará pelo mesmo ponto durante um intervalo de tempo Δt , isto é, de acordo com a Equação 2.80.

$$U_{ij} \Delta t > |\mathbf{X}_i(t_n) - \mathbf{X}_j(t_n)| - r_i - r_j \quad (2.80)$$

Se ambas as condições forem satisfeitas, o PDF dependente da rede fornecida pelas Equações 2.70 e 2.71 é substituído pela Equação 2.81 de probabilidade de colisão

$$P = \left(\frac{r_i + r_j}{\max\{r_i + r_j, \Delta_{ij}\}} \right)^{C_1} \exp \left(-C_2 \frac{|\alpha_m - \beta_m|}{\Delta t} \right) \quad (2.81)$$

Onde, C_1 e C_2 são constantes do modelo, e $\Delta_{ij} = | \mathbf{p}_j(\beta_m) - \mathbf{p}_i(\alpha_m) |$ é a distância mínima entre as trajetórias $\mathbf{p}_i = \mathbf{x}_i(t_n) + \alpha \mathbf{u}_i$ e $\mathbf{p}_j = \mathbf{x}_j(t_n) + \beta \mathbf{u}_j$, determinado usando a restrição de acordo com a Equação 2.82.

$$\frac{\partial |\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j|}{\partial \alpha}(\alpha_m, \beta_m) = \frac{\partial |\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j|}{\partial \beta}(\alpha_m, \beta_m) = 0 \quad (2.82)$$

A equação 2.82 produz as Equações 2.83 lineares

$$-\alpha_m \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j + \beta_m \mathbf{u}_j \cdot \mathbf{u}_j = (\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j) \cdot \mathbf{U}_j, \quad (2.83)$$

$$\alpha_m \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_i - \beta_m \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j = -(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j) \cdot \mathbf{U}_i,$$

para calcular α_m e β_m .

Se um número aleatório q uniformemente distribuído entre zero e a unidade for menor do que a probabilidade de colisão dada pela Equação (2.81), as gotículas das duas parcelas colidem uma com a outra e as Equações de O'Rourke (2.72) à (2.78), com r_i^3 e r_j^3 sendo substituídos por M_i e M_j no OpenFOAM, são chamados para simular coalescência e colisões de pastagem.

2.3.5 Modelo de Evaporação

Ao modelar a evaporação de uma gotícula, o parâmetro essencial é o tempo de vida ou o tempo de relaxamento da evaporação da gota. A derivação desse tempo começa avaliando o tempo-derivado da massa da gotícula, de acordo com a Equação 2.84.

$$\frac{dm_d}{dt} = \rho_d \frac{d}{dt} \left[\frac{4}{3} \pi \left(\frac{D}{2} \right)^3 \right] = \frac{\rho_d \pi}{2} D^2 \frac{dD}{dt} \quad (2.84)$$

Além disso, presume-se que a evaporação siga a lei D2 empírica, fornecida pela Equação 2.85.

$$\frac{dD^2}{dt} = C_e \rightarrow \frac{dD}{dt} = \frac{C_e}{2D} \quad (2.85)$$

Em que C_e é uma constante. A partir da Equação 2.85, pode-se determinar o tempo de relaxamento por integração (uma vez que C_e é uma constante), tendo assim a Equação 2.86.

$$D^2 = C_e t + D_0^2 \quad (2.86)$$

Para determinar o tempo (τ_e) quando uma gotícula de tamanho D_0 tiver evaporado completamente, pode-se colocar $D = 0$ na Equação 2.85, resultando na Equação 2.87.

$$\tau_e = -\frac{D_0^2}{C_e} \quad (2.87)$$

A incógnita nesta equação é a constante C_e , que será determinada inserindo a equação 2.85 na equação 2.84, o resultado é a Equação 2.88.

$$\frac{dm_d}{dt} = \frac{\rho_d \pi}{4} D C_e \quad (2.88)$$

No entanto, de acordo com Nordin (2001) a derivada de tempo da massa da gota também pode ser expressa com a Equação 2.89.

$$\frac{dm_d}{dt} = -\pi D S h \vartheta \rho_v \ln \left(\frac{p - p_{v,\infty}}{p - p_{v,S}} \right) = \pi D S h \vartheta \rho_v \ln \left(1 + \frac{X_{v,S} - X_{v,\infty}}{1 - X_{v,S}} \right) \quad (2.89)$$

De acordo com Crowe (1998), o número de Sherwood (Sh) é calculado usando a correlação de Ranz-Marshall (ou Frössling) dada pela Equação 2.90

$$Sh = 2 + 0.6 R_e^{1/2} S C^{1/3} \quad (2.90)$$

A Equação 2.87 agora pode ser usada com C_e conhecido para resolver a Equação 2.89, tendo como resultado a Equação 2.91.

$$\frac{dm_d}{dt} = -\frac{m_d}{\tau_e} \quad (2.91)$$

onde o tempo de relaxamento é dado pela Equação 2.92.

$$\tau_e = \frac{\rho_d D^2}{6DS h \rho_v \ln \left(1 + \frac{X_{v,S} - X_{v,\infty}}{1 - X_{v,S}} \right)} \quad (2.92)$$

e uma equação semelhante para o diâmetro (Equação 2.85) é dado pela Equação 2.93.

$$\frac{dD}{dt} = -\frac{D}{3\tau_e} \quad (2.93)$$

Um tempo de relaxamento é introduzido para caracterizar a evolução do tamanho das partículas. Se um método explícito for usado, o intervalo de tempo (uma função da escala de tempo de relaxamento) não deve ser maior que o tempo de relaxamento, ou a massa se tornará negativa. Se um método implícito é usado, o método é incondicionalmente estável. Também é consistente com o modo como as equações de conservação de velocidade e de transferência de calor para cada parcela são resolvidas. A diferença nas escalas de tempo desses processos é útil para determinar a taxa na qual cada processo está em andamento.

2.3.6 Modelos de Turbulência

O modelo de combustão tem por finalidade acoplar os efeitos turbulentos e químicos do escoamento para descrever a chama turbulenta. Assim sendo, as equações de conservação e, portanto, as equações de Navier-Stokes são a essência para o modelamento do fenômeno de combustão. Existem métodos diferentes para resolver as equações de Navier-Stokes e, como geralmente são operações com alto custo computacional, desenvolveram três

metodologias dedicadas a casos menos exigentes do ponto de vista da precisão e dimensão física do fenômeno.

DNS, *Direct Numerical Simulation*, é a abordagem conceitualmente mais simples, que consiste na discretização de espaço e tempo com malhas suficientemente pequenas que também podem capturar fenômenos de microescala. Essa abordagem retorna resultados precisos, mas possui um alto custo computacional mesmo para problemas simples.

RANS, *Reynolds Averaged Navier-Stokes*, baseia-se no pressuposto de que o movimento turbulento pode ser visto como se fosse caracterizado por um movimento médio. Como utiliza-se da média do movimento essa metodologia precisa de equações adicionais para descrever o papel da turbulência no campo de movimento e no transporte de grandezas. É uma abordagem muito utilizada pois é menos exigente do ponto de vista computacional, sendo necessário avaliar caso a caso o nível de precisão exigido pelo problema.

LES, *Large Eddy Simulation*, prevê a simulação direta das maiores escalas turbulentas, estritamente dependentes da geometria do injetor e modela adequadamente as escalas menores utilizando modelos complementares. Essa abordagem fornece resultados mais precisos que o RANS, entretanto o tempo necessário para o cálculo é muito alto. Desta maneira seu uso é restrito a casos em que a necessidade de obter um resultado preciso justifique o alto custo computacional.

2.4 EVOLUÇÃO CFD EM MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA

Nesta seção objetiva-se realizar uma evolução cronológica das principais metodologias implementadas em CFD exclusivamente para motores de combustão interna. Cabe salientar que o intuito desta seção não é abordar todos os projetos e trabalhos relacionados ao tema. No entanto, pretende-se acompanhar a evolução e amadurecimento das simulações fluidodinâmicas aplicadas a motores de combustão interna.

Segundo Kasper (2003) os trabalhos de fluidodinâmica computacional em motores de combustão interna surgiram apenas por volta de 1990. Nesta época o trabalho de Kim *et al.* (1990) foi tido como um dos mais relevantes por analisar o efeito transiente do escoamento gasoso com indução de *spray* combustível em um motor de injeção direta com gasolina. No trabalho em questão, os autores investigam o escoamento e a admissão de gasolina no interior do cilindro, utilizando um pistão de base plana e outro pistão de base irregular, nos instantes de admissão e de máxima compressão do pistão. O programa

empregado foi o KIVA-II e utilizou-se para a conclusão do estudo um pistão e quatro válvulas no cilindro em uma geometria tridimensional, além de um modelo de colisão de *spray* combustível. Os resultados relevantes desta pesquisa mostraram que, de modo efetivo, os efeitos dinâmicos foram retratados numericamente pelo movimento do pistão e das válvulas, independentemente de sua geometria.

Posteriormente, Pinchon (1991) utilizou o *programa* KIVA para modelar a turbulência utilizando o modelo $k-\varepsilon$ padrão. Realizou-se uma modelagem a frio, ou seja, apenas ar, outra modelagem a quente considerando a axi-simetria e por fim modelou-se um motor diesel. Nas simulações realizadas os perfis de pressão e velocidade apresentaram comportamento semelhante com os dados adquiridos experimentalmente. O autor relatou a dificuldade em modelar um motor e seus componentes visto que se trata de um fenômeno em regime transiente devido ao movimento temporal do pistão e o trabalho das válvulas em função do ângulo do virabrequim. O autor ainda ressaltou as complexidades em modelar as câmaras de combustão com suas complexas representatividades geométricas, mas descreveu um método para modelar as condições de contorno nas válvulas e as transferências de calor nas paredes do domínio.

Stevenson e Chen (1997) utilizando o *programa* FLOW-3D, que deu origem ao *programa* CFX-4, conseguiram uma boa aproximação ao fazer uma analogia empírica, teórica e numérica acerca do desempenho fluidodinâmico de uma válvula de admissão utilizando uma válvula bidimensional com o modelo de turbulência $k-\varepsilon$ padrão.

O trabalho de Werner *et al.* (1998) utilizado o programa STAR-CD consagrou-se como um marco para a Fluidodinâmica Computacional, graças à parceria entre três entidades alemãs, estando de um lado uma indústria automobilística, de outro um centro de pesquisa universitário juntamente com um fabricante de computadores. Nessa parceria conseguiu-se reduzir o tempo de simulação de um motor de combustão interna de seis meses para uma semana. Naturalmente que várias foram as considerações e simplificações para conseguir tal objetivo, mas não diminuiu o mérito e o legado de uma nova forma de simulação, com mais agilidade e sem perder a confiabilidade comparada com o experimental.

Gosman (1999), além de descrever as principais formas que uma malha poderia adquirir, ressaltou que os padrões de segunda ordem são os ideais para a discretização espacial. Neste trabalho o autor concluiu que o modelo de turbulência LES (*Large Eddy Simulation*) no futuro deveria substituir os modelos de turbulência $k-\varepsilon$ padrão e que naquele

ano, as simulações já poderiam servir para projeto e dimensionamento de motores e não somente para pesquisas.

Bailly *et al.* (1999) elaboraram uma linguagem computacional no qual se tornou possível manusear uma malha móvel sem interferência do programador, desta maneira válvulas e pistões passaram a ser interpolados através de um novo conceito que era proveniente do método de elementos finitos e volume finitos. Além das linguagens computacionais os autores validaram com sucesso seus modelos com dados experimentais.

Haword e Jansen (2000) iniciaram uma nova era de abordagem da fluidodinâmica computacional ao adotar o modelo LES como o modelo de turbulência. Eles contrariaram a maioria das pesquisas, visto que na época os modelos eram baseados nas equações médias temporais de Reynolds, conhecida como RANS (*Reynolds Average Navier-Stokes Equations* - Equações médias de Navier-Stokes de *Reynolds*).

No mesmo ano, os pesquisadores Fan e Reitz (2000) utilizaram o programa KIVA-3 para modelar a quebra do combustível em um motor de ignição por centelha utilizando o modelo DPIK (*Discrete Particle Ignition Kernel* - Ignição discreta de partículas Kernel) que é baseado nos conceitos Euleriano-Lagrangeano. Os autores conseguiram simular a propagação da chama e deixaram suas contribuições para otimizar o modelo utilizado.

Nkonga (2000) se destacou ao conseguir elaborar um modelo com malha variável, desenvolvendo uma linguagem extremamente complexa. O autor utilizou o modelo de turbulência RANS para desenvolver uma metodologia de relaxação de malha. Tal metodologia tinha como essência a integração temporal de primeira ordem e a integração espacial de segunda ordem. Seguindo este conceito o autor teve sucesso em sua metodologia apesar das dificuldades em se trabalhar com as fronteiras móveis.

Milton *et al.* (2001), utilizando o programa FLUENT, conseguiram concluir através de suas simulações que a vazão de entrada de combustível, a posição do injetor e a abertura das válvulas são fatores que influenciam o comportamento das gotas de combustível no interior do cilindro. As simulações apresentadas por estes autores mostraram convergência com os experimentos realizados por eles.

Johan *et al.* (2001) utilizando o programa SPECTRUM apresentaram um estudo da caracterização do *spray* na admissão, da combustão e do campo de pressão no cilindro ao longo do tempo. Os autores ao longo do trabalho detalham todas as etapas necessárias para que a simulação ocorra de maneira assertiva e ágil. Detalhes das características das malhas e condições de pós-processamento são abordados pelos autores.

Kasper (2003) utilizou o programa CFX-TASCflow™ para simular uma câmara de combustão em uma geometria cilíndrica de duas válvulas. Os combustíveis avaliados foram o metano e o heptano, em que dois mecanismos de reação, sendo um de simples e outro de dupla etapa, foram avaliados para o metano, e um mecanismo com quatro etapas de reação para o heptano. O autor concluiu que houve poucas diferenças entre os mecanismos de reação e os combustíveis avaliados a partir do modelo de combustão utilizado neste trabalho.

Shim *et al.* (2008) apresentaram um modelo de quebra do combustível para um motor de injeção direta a gasolina. Tal simulação considerou o processo de quebra do *spray* de combustível de cone oco composto pelo modelo LISA para o processo de separação primária. O modelo APTAB (*Aerodynamically Progressed Taylor Analogy Breakup* - Rompimento Análogo de Taylor Progressivamente Aerodinâmico) em vez do TAB foi utilizado no processo de quebra secundária. Os autores concluíram que o novo modelo apresentou melhor capacidade de previsão em relação ao modelo anterior, modelo LISA mais TAB. A partir dos resultados calculados, o efeito da pressão ambiente no SMD e na velocidade da gota puderam ser discutidos quantitativamente.

Persson (2010) utilizou o programa OpenFOAM para descrever a implementação da injeção de partículas na classe dieselSpray. Além disto, o autor implementou um injetor de partículas na classe de partículas sólidas, algo com um certo grau de complexidade visto que o programa não possui ferramenta para a injeção de partículas sólidas. No decorrer do trabalho Persson (2010) ainda apresentou os códigos computacionais utilizados na pesquisa e suas simulações, que estão de acordo com a bibliografia.

Sacomano Filho (2011) utilizou o programa FLUENT para modelar e simular uma chama turbulenta de *spray* de etanol. O *spray* foi calculado com a aproximação de escoamentos separados com uma formulação Euler-Lagrange, em que a fase dispersante é modelada com a abordagem Euleriana, enquanto a fase dispersa é modelada com a abordagem Lagrangeana. O modelo de turbulência adotado foi o k-ε padrão para escoamentos com baixo número de Mach e em regime permanente. O autor concluiu que algumas distorções ocorreram devido a difusão superestimada das quantidades médias transportadas pela fase gasosa.

Reis (2015) desenvolveu no CTM, Centro de Tecnologia da Mobilidade, da UFMG, uma análise numérica tridimensional do *spray* com o programa STAR-CCM+9. O autor utilizou um injetor do tipo *pressure swirl atomizer*, injetando etanol em uma câmara atmosférica quiescente. Para a primeira quebra da atomização o modelo LISA foi utilizado e

para a quebra secundária foram analisados dois modelos distintos, o modelo de Kelvin-Helmholtz e Rayleigh-Taylor (KHRT) e o modelo de Reitz-Diwakar. Ambos os modelos foram avaliados com e sem o modelo de colisão entre as partículas, conseguindo-se que todos os modelos apresentassem um comportamento semelhante à curva experimental. Entretanto os modelos utilizados não descreveram o comportamento do *pré-spray*.

Amorim (2016) utilizando do programa STAR-CD, caracterizou numericamente a injeção do etanol e a formação de mistura em um motor de duas válvulas em fase de projeto. A metodologia proposta mostrou bons resultados da recirculação do ar no interior do cilindro e na abertura das válvulas, sendo possível caracterizar os parâmetros de *tumble* e *swirl*, durante as fases de admissão e compressão.

Guzzo (2017) por meio de uma análise experimental e uma metodologia computacional criada para análise de imagens, estudou-se a injeção de gasolina e etanol em condições estáticas e a injeção de etanol em um motor monocilíndrico de pesquisa. Nas injeções em condições estáticas não foram verificadas diferenças significativas entre os dois combustíveis. Entretanto, na injeção de etanol em condições dinâmicas, verificou-se forte dependência dos sprays de etanol com a condição de rotação do motor.

Leitz *et al.* (2018) desenvolveram um modelo de simulação baseado no *solver* reagente de *ParcelFoam* do OpenFOAM para uma análise da velocidade e temperatura da partícula no bocal do injetor a frio. O modelo combina uma descrição compressível do escoamento de gás no bocal com um rastreamento de partículas Lagrangianas. As previsões do modelo de simulação são verificadas com base em uma descrição analítica do escoamento de gás, aceleração de partículas e aquecimento no bocal.

2.5 MODELAGEM CFD DA COMBUSTÃO EM MOTORES COM INJEÇÃO DIRETA

Nesta seção objetiva-se realizar uma evolução cronológica dos principais modelos matemáticos a respeito da combustão da mistura implementadas em CFD exclusivamente para motores de combustão interna. Cabe salientar que o intuito desta seção, também, não é abordar todos os projetos e trabalhos relacionados ao tema e muito menos qualificar tais pesquisas ao longo do tempo. No entanto, pretende-se convidar o leitor a acompanhar a evolução e amadurecimento das simulações fluidodinâmicas aplicadas a motores de combustão interna

Segundo Drake e Haworth (2007) vários submodelos são formulados para descrever os processos relacionados ao comportamento da malha, da atomização, quebra e deformação de gotículas, colisão e coalescência de gotículas, vaporização de gotículas e impacto entre *spray* e parede. Com base nas capacidades do CFD, a modelagem por *spray* para a tecnologia de injeção direta ainda é relativamente pouco compreendida, o que é parcialmente causado pela dificuldade em obter medições ópticas na região próxima ao injetor.

Tan *et al.* (2016), realizaram uma pesquisa e descreveram os mais utilizados submodelos, em diversos *programas*, que caracterizam o comportamento da combustão em um motor de injeção direta. Estes modelos foram validados com dados ópticos e/ou experimentais.

Yang e Reitz (2009), utilizaram os submodelos CMC e Equação-G para caracterizar a combustão estratificada no programa KIVA-3V e seus resultados foram comparados com a pressão no cilindro e a taxa de liberação de calor.

Dahms *et al.* (2009), no programa ACFluX utilizaram os submodelos k- ϵ de turbulência, *spray*, SparkCIMM e Equação-G para caracterizar a combustão estratificada. Os parâmetros comparados foram a luminosidade de combustão e os contornos de probabilidade de chama.

Bai *et al.* (2010), utilizaram os submodelos de combustão WAVE, o impacto na parede de Naber e Reitz e PDF-Combustão. Os resultados da simulação realizada no programa FIRE foram validados com o formato do *spray*, o comprimento de penetração e a pressão no cilindro. Estes modelos foram utilizados para uma combustão homogênea e estratificada.

Dahms *et al.* (2012), no programa ACFluX utilizaram os submodelos k- ϵ de turbulência, SparkCIMM, Equação-G, DDM, CMC, abordagem Lagrangiana e o impacto na parede de Grover *et al.* para caracterizar a combustão estratificada. Os parâmetros comparados foram os contornos de probabilidade de chama, pressão no cilindro, taxa de liberação de calor, pontos característicos de combustão e a eficiência da combustão.

Yang *et al.* (2012), no programa CONVERGE utilizaram os submodelos RNG k- ϵ de turbulência, abordagem Lagrangeana, impacto de parede de O'Rourke e Amsden, Combustão Arrhenius e deposição de energia de centelha para caracterizar a combustão homogênea. O parâmetro comparado foi a taxa de liberação de calor.

Givler *et al.* (2013), no programa CONVERGE utilizaram os submodelos RNG k- ϵ de turbulência, KH-RT e multi-zone para caracterizar a combustão homogênea e estratificada. O parâmetro comparado foi a pressão no cilindro.

Bonatesta *et al.* (2014), no programa STAR-CD, utilizaram os submodelos RNG k- ϵ de turbulência, abordagem Lagrangiana, modelo de quebra de Reitz-Diwakar, modelo de parede de Bai-Onera, ECFM de 3 zonas e NO de Zeldovich *et al.* para caracterizar a combustão homogênea. Os parâmetros comparados foram o formato do *spray*, comprimento de penetração, SMD, pressão no cilindro e a taxa de variação de pressão.

Costa *et al.* (2014), no programa FIRE, utilizaram os submodelos DDm, o impacto de parede de Mundo-Sommerfeld, ECFM de 3 zonas para caracterizar a combustão homogênea. Os parâmetros comparados foram o formato do *spray*, pressão no cilindro, massa específica da superfície da chama e a emissão de NO e UHC.

Kim *et al.* (2015), no programa KIVA-3V, utilizaram os submodelos RNG k- ϵ de turbulência, abordagem Lagrangiana, KH-RT, impacto de parede de O'Rourke e Amsden, DPIK e Equação-G para caracterizar a combustão homogênea. Os parâmetros comparados foram a forma do *spray*, comprimento de penetração, SMD, pressão no cilindro, a taxa de variação de pressão e velocidade de chama.

Beavis *et al.* (2018), no programa STAR-CD, utilizaram uma abordagem de modelagem de turbulência RANS, LES e um DDM Lagrangeano para modelar um evento de injeção, para avaliar os regimes de combustão em um motor de injeção direta de combustível. Os parâmetros comparados foram as flutuações de velocidade próximas aos eletrodos das velas, o número de Damkohler (mede a escala de tempo de uma reação química versus o fenômeno de transporte) e o número de Reynolds.

2.6 ESTADO DA ARTE

Esta seção apresenta os principais trabalhos relacionados com a fluidodinâmica computacional aplicado a motores de combustão interna para análise do *spray* e da combustão usando o OpenFOAM. Cabe salientar que o intuito desta seção não é abordar todos os projetos e trabalhos relacionados ao tema e muito menos qualificar tais pesquisas, mas pretende-se evidenciar os trabalhos que de forma, direta ou indireta, deixaram sua contribuição ao projeto desta tese. Com este objetivo, são analisados apenas os trabalhos científicos mais importantes sobre o tema em estudo, que contribuíram para o

desenvolvimento deste trabalho e possibilitaram a criação, nesta tese, de um modelo inédito capaz de caracterizar o *spray* de combustível e a combustão da mistura.

Piscaglia *et al.* (2019) desenvolveram um novo modelo matemático dinâmico de duas fases de volume de fluido para estudar a física da atomização e a cavitação dentro de injetores de combustível de alta pressão. O modelo foi baseado em modelos apresentados por Schnerr e Sauer (2000) e a validação do código foi realizada comparando os resultados numéricos utilizando o OpenFOAM com dados experimentais. Por fim, discutiram os limites de aplicabilidade do modelo.

Aguerre e Nigro (2019) apresentaram um modelo de atomização baseado em Lagrange e implementaram seus modelos no OpenFOAM. As fases gasosa e líquida foram acopladas usando uma estratégia implícita que foi baseada em uma divisão das derivadas temporais da fase gasosa. Os processos de atomização foram representados por uma estratégia híbrida que combina os modelos de Hug-Gosman, Kelvin-Helmholtz e Rayleigh-Taylor. Para calibrar o modelo, os resultados numéricos foram comparados com os dados experimentais do injetor do *Spray G* da Engine Combustion Network.

Khan *et al.* (2018) desenvolveram uma metodologia computacional para atomização não evaporativa em uma câmara quiescente usando o método LES. O *spray* foi injetado com um ângulo, velocidade e tamanho de gota conhecidos em uma câmara quiescente com condições ambientais. O comportamento da atomização foi comparado com as características do jato monofásico, desta maneira os resultados forneceram base para a seleção dos modelos de turbulência adequados e perfis de injeção de gotas para a simulação da atomização em condições ambientais quiescentes. Por fim, as simulações da atomização foram realizadas em condições realistas do motor.

Migliaccio *et al.* (2017) buscaram sanar os altos índices de emissões para as pressões de 30, 80 e 120 MPa em motores a gasolina de injeção direta caracterizando o bico de cone oco de um novo injetor com um sistema de atuação piezoelétrico dedicado. Para a análise do comportamento do *spray* utilizaram a biblioteca do OpenFOAM e os resultados mostraram uma estrutura de atomização típica, ou seja, circunferencialmente bem distribuído, mas exibindo uma penetração de ponta reduzida.

Khan *et al.* (2017) realizaram um estudo numérico para caracterizar o comportamento da ebulição instantânea em um *spray* de injeção direta de gasolina. Os modelos de injeção geralmente usados nas simulações de *spray* são incapazes de modelar os efeitos da ebulição instantânea, portanto os pesquisadores introduziram um novo modelo de

injeção por atomização no OpenFOAM. Os pesquisadores concluíram que os resultados se mostraram coerentes com os dados experimentais.

Krastev *et al.* (2017) acreditam que o padrão para modelagem de turbulência nos motores de combustão interna ainda seja representado pela forma instável da equação de Navier Stokes (URANS) e esta seja capaz apenas de retornar uma descrição estatística da turbulência. Os pesquisadores propuseram uma modificação capaz de resolver o modelo RNG k- ϵ URANS. A modificação foi baseada em uma estrutura DES, *detached-eddy simulation*, que permitiu definir explicitamente o comportamento dos modelos (URANS, DES ou LES) em diferentes zonas do domínio computacional.

Shafae e Mahmoudzadeh (2017) propuseram uma simulação numérica de um injetor de ar utilizando o programa OpenFOAM para avaliar os efeitos dos parâmetros geométricos e as condições de escoamento nas características do *spray*. O método usado na simulação numérica é a abordagem Euleriana-Lagrangiana discreta baseada em rastreamento de gotículas. Na separação primária da modelagem do *spray* líquido, foi utilizado a função de distribuição Rosin-Rammler e na modelagem da fase de separação secundária, os modelos Kelvin-Helmholtz, Rayleigh-Taylor (KHRT) e TAB foram usados e comparados. Os resultados da simulação de Shafae e Mahmoudzadeh (2017) verificou que o diâmetro médio de Sauter, SMD, aumenta com o aumento do diâmetro na saída do injetor. No entanto, para número alto de Weber, esse parâmetro tem pouco efeito no SMD. Além disso, o ângulo de injeção de líquido-gás tem um efeito insignificante na profundidade da penetração da atomização.

Baldwin *et al.* (2016) usando um *solver* desenvolvido na Universidade de Massachusetts, mas com extensão orientada as bibliotecas do OpenFOAM realizaram um estudo computacional para investigar a influência do movimento transitório da agulha no escoamento interno de um injetor de gasolina. As condições de não intermitência (*spray G*) e intermitência (*spray G2*) especificadas pela *Engine Combustion Network*, ECN, foram modeladas usando a geometria nominal do bico do pulverizador G. Os resultados foram qualitativamente validados comparando com imagens experimentais. No experimento a taxa do perfil de injeção foi capturada com precisão usando condições limites de pressão e movimento da agulha para ativar a injeção.

Tan *et al.* (2016) mostraram os principais modelos de combustão aplicados a motores a gasolina com injeção direta. Foram estudados o modelo EBU, o modelo CTC (combustão em tempo característico), o modelo BML (Bray-Moss-Libby), o CFM (modelo de chama coerente) e suas variantes, o modelo de Equação G e o modelo FSC (fechamento

da velocidade da chama). Inicialmente desenvolvido por Spalding (1971) no modelo EBU as taxas de reação são controladas pela taxa de arrasto causada pela mistura turbulenta. Já no modelo CTC criado por Abraham *et al.* (1985) o tempo de conversão é uma combinação do tempo de mistura turbulenta e do tempo da cinética química. No modelo BML o estado termoquímico da mistura é expresso com uma variável do progresso da combustão, c , baseado no conceito de uma pequena chama, tal modelo foi concebido por Bray (1980). O modelo CFM leva em consideração que a taxa de reação química é o produto da reação por unidade de área da pequena chama e a massa específica da superfície da chama, este modelo foi desenvolvido por Marble e Broadwell (1977). No modelo de Equação G, criado por Peter (2000) a superfície da chama é descrita por uma função regular, G com a hipótese de espessura desprezível na abordagem do conjunto de níveis. Por fim, no modelo FSC de Lipatnikov e Chomiak (2002), a combustão é modelada como uma equação de transporte para a variável de avanço de reação.

Hélie *et al.* (2016) investigaram os efeitos do escoamento e da turbulência no início do *spray* e os resultados encontrados utilizando o OpenFOAM foram comparados com as medidas obtidas para atomização não evaporativa sob condições quase constantes, que na prática correspondem a uma injeção de longa duração. Os efeitos do escoamento e da turbulência no início do *spray* simulados em alta pressão de injeção mostraram boa concordância com os dados experimentais.

Andreini *et al.* (2016) apresentaram em seu trabalho um *solver* euleriano multifásico, com o objetivo de incluir todos os principais fenômenos físicos que caracterizam a quebra de combustível líquido. O estudo desenvolvido no OpenFOAM começa com o modelo Euleriano derivado do modelo de quebra Euleriana-Lagrangeana (ELSA). Esta abordagem é adequada para descrever o escoamento de líquido-gás para toda a fração de volume de líquido-gás, sem qualquer suposição sobre a topologia da fase (gotículas, bolhas, ligamentos ou quaisquer estruturas contínuas). No entanto, devido ao seu formalismo de escoamento monofásico, a velocidade de deslizamento entre as fases é ocultada no termo de escoamento líquido turbulento dentro da equação de fração de volume do líquido. Um inovador fechamento de segunda ordem para esta variável foi proposto e implementado. As dimensões do domínio foram menores que o canal utilizado nos experimentos, mas os autores destacaram que as dimensões reduzidas podem ser consideradas com segurança, não afetando os resultados obtidos. O tubo de líquido foi incluído no domínio computacional para prever corretamente o escoamento de saída necessário para uma modelagem adequada da interação entre o *spray* e o escoamento

cruzado. Já as condições de contorno aplicadas seguiram um esquema clássico para escoamentos constantes incompressíveis com uma velocidade uniforme prescrita nos limites de entrada e na pressão estática atribuída na saída

No trabalho apresentado por Ghadimi *et al.* (2016) uma simulação numérica em 3-D do escoamento bifásico foi conduzida em um motor de injeção direta de combustão interna usando a abordagem Euleriana-Lagrangiana e um novo modelo de quebra foi proposto. O método de quebra modificado foi implementado para simular a injeção de diesel a pressões de 100; 150; 200 e 300 MPa. Os efeitos do comprimento de penetração, quebra e o modelo de colisão nas características do *spray* e do gás no cilindro foram examinados usando o código aberto OpenFOAM. A penetração por atomização e o ângulo do cone foram investigados à medida que as propriedades do *spray* e o movimento do gás circundante são estudados pela velocidade do gás no cilindro e pela distribuição de pressão para condições de não-evaporação. Além disso, a penetração de vapor do *spray* foi apresentada para estudar os efeitos do modelo de corrente na condição de evaporação. O campo contínuo foi descrito pelas equações RANS e a dinâmica da gota dispersa foi modelada pelo método de rastreamento Lagrangeano. Os resultados do modelo KHRT modificado proposto foram comparados com outros métodos padrão no OpenFOAM e uma concordância favorável foi alcançada. A robustez e a precisão de diferentes métodos de quebra e modelos de colisão também foram verificadas usando os dados experimentais publicados. Demonstrou-se que o método de desmembramento proposto e o modelo de colisão exibem resultados coerentes com os dados experimentais.

Kösters *et al.* (2015) compararam o desempenho dos modelos *multiple Representative Interactive Flamelet* (mRIF), o *modelo de Volume Reactor Fraction Model* (VRFM), e o *Well-Stirred reactor* (WS) na descrição das chamas. O atraso de ignição previsto e o comprimento de elevação da chama dos *sprays* de n-heptano foram comparados aos resultados experimentais publicados dentro da *Engine Combustion Network*.

Trask (2010) disserta em seu trabalho a respeito das dificuldades em se obter por simulação numérica a resolução de pequenas escalas do processo de quebra operando com números extremamente altos de Reynolds e Weber. Ainda segundo o autor, técnicas experimentais também se mostraram incapazes de resolver as características em pequena escala de formação da quebra devido à complexidade topológica da zona de quebra primária e a natureza opticamente densa. Os injetores de vórtice coaxial centrados em gás (GCSC), da pesquisa de Trask (2010), são muito difíceis de caracterizar, devido ao fato de que a quebra ocorre dentro de um copo pequeno, impedindo o uso de abordagens tradicionais, como o

diagnóstico a laser, para medir a massa específica de atomização. Diante do exposto, a pesquisa teve como objetivo encontrar um método preditivo capaz de caracterizar a qualidade da quebra usando uma quantidade viável de recursos computacionais. Um *solver* implementando um modelo Euleriano para o processo de quebra foi escrito usando a biblioteca do OpenFOAM. O modelo assume que em altos números de Reynolds e Weber, o processo de quebra ocorre em pequenas escalas e não afeta o movimento em malha da escala do escoamento. Usando o formalismo de decomposição de Reynolds tipicamente empregado na modelagem de turbulência, as equações governantes médias da massa para o movimento médio da mistura líquido-gás foram calculadas exatamente enquanto as características turbulentas de pequena escala do escoamento foram resolvidas através de modelos de fechamento. Trask (2010) apresentou uma série de casos de validação para demonstrar a precisão do modelo. O modelo foi usado para prever o escoamento interno de um injetor GCSC e o *spray* formado por um jato subsônico em escoamento cruzado, posteriormente foi comparado com resultados experimentais.

As diferenças entre as correlações foram atribuídas pelas diferenças nas técnicas experimentais entre os estudos e as diferenças nas condições operacionais ambientais. Enquanto a penetração do núcleo líquido primário é significativamente menor do que o previsto pelas correlações, a região dispersa externa do *spray*, contendo a maior parte da área superficial da interface, mostra excelente concordância.

2.7 CONSIDERAÇÕES FINAIS DA REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão bibliográfica apresentada se torna relevante para a delimitação e contextualização do problema e se torna imprescindível para entender as contribuições das novas metodologias desenvolvidas neste trabalho.

A partir da revisão bibliográfica apresentada, algumas conclusões importantes podem ser observadas:

- a) No início da década de 1990, o interesse e o desenvolvimento do motor com injeção direta (GDI) renasceram para o mercado automobilístico. Este modelo de motor começou a ser implementado nas linhas de produção a partir do ano de 1996, ou seja, há pouco mais de 20 anos. É importante salientar que ainda hoje vários fabricantes

ainda não adotam essa tecnologia em seus recentes modelos de automóveis, como é o caso da maioria de montadoras brasileiras;

- b) Nos motores GDI, a injeção direta de combustível na câmara de combustão apresenta um tempo inerentemente menor disponível para evaporação e mistura do combustível. Isso requer a necessidade de pressões de injeção mais altas para obter uma atomização com boa penetração. O estudo da modelagem por atomização é, portanto, essencial para formular estratégias adequadas de atomização e injeção e para otimizar os projetos dos injetores.
- c) Os motores de injeção direta de carga estratificada envolvem a criação de uma região de mistura pobre de combustível e ar no cilindro;
- d) No injetor piezoelétrico ou solenoide, o *spray* sofre influência da temperatura e pressão de injeção, do tipo de combustível e do meio em que o combustível é injetado;
- e) Devido à natureza móvel do *spray* e ao movimento aleatório das gotas, é necessária uma malha refinada na zona de atomização. O *solver spray-DyMFoam* do programa OpenFOAM é capaz de criar uma malha computacional móvel;
- f) O processo de formação do *spray* envolve duas fases principais, que são a quebra primária e a secundária. Segundo a literatura, existe pouca importância da quebra primária na faixa funcional da atomização, desta maneira recomenda-se que a distribuição de gotículas geradas a partir da quebra primária seja estimada usando a função de distribuição de probabilidade Rosin-Rammler;
- g) Os principais parâmetros da combustão utilizados para validação do modelo matemático, a luz das últimas pesquisas, estão relacionados ao comprimento de penetração, formato do *spray*, pressão no cilindro, taxa de transferência de calor, SMD, velocidade de chama e ignição;
- h) A modelagem numérica de combustão é importante visto que proporciona à equipe de projetos de sistemas de combustão uma quantidade enorme de dados difíceis, e as vezes impossíveis, de se obter experimentalmente a custo baixo;
- i) Como a combustão trata da interação entre fenômenos físicos e químicos, associados à turbulência, busca-se para se inserir tais códigos em ambiente industrial, uma simplificação que balanceie qualidade de resultados e agilidade na obtenção dos mesmos;
- j) Os trabalhos de fluidodinâmica computacional em motores de combustão interna surgiram apenas por volta de 1990, ou seja, há cerca de trinta anos. Considerando

que o OpenFOAM foi criado em 2004, desta maneira este programa possui apenas quinze anos de aperfeiçoamento e atualizações, o que representa um espaço curto de tempo, considerando a evolução das novas tecnologias;

- k) Com legislações ambientais cada vez mais rigorosas e o alto custo para adquirir e manter os programas comerciais, o panorama mostra-se favorável para a simulação de motores com injeção direta utilizando um programa livre;
- l) Nota-se a necessidade de criação de uma metodologia para simulação numérica de motores utilizando um programa livre, que contemple uma análise mais detalhada e realista a respeito dos modelos matemáticos que caracterizam o *spray* e a combustão em motores de combustão interna de injeção direta;
- m) Observa-se a dificuldade de prever experimentalmente o *spray* de combustível e a combustão da mistura, assim como constata-se a inexistência de um modelo matemático capaz de representar o comportamento da atomização do *spray* junto ao injetor.
- n) Os últimos trabalhos desenvolvidos pelos diferentes pesquisadores mostram que existem diversas simplificações nos modelos que caracterizam o *spray* e a combustão em um motor automotivo. Diante disto, esta tese apresenta uma relevância no campo da pesquisa e do desenvolvimento ao propor novos modelos matemáticos que geram resultados que se aproximam mais do comportamento real dos *sprays* e da combustão.

3. METODOLOGIA

Este capítulo descreve a metodologia para obtenção de resultados sobre a caracterização do *spray* de combustível e da combustão da mistura em um cilindro do motor de combustão interna utilizando o programa OpenFOAM. Os modelos de quebra, evaporação, penetração, dispersão das gotas, colisão das gotas, definição de trajetória e combustão são definidos e posteriormente analisados os principais parâmetros do *spray* de cone oco de combustíveis descarregados por um injetor na câmara de combustão de um motor de combustão interna, com posterior análise da combustão.

Cabe salientar que um grande benefício de usar um código fonte aberto para implementar novos modelos e métodos é que os usuários têm acesso total ao código fonte. Por consequência, tem-se mais liberdade ao implementar modelos do que normalmente é possível com códigos CFD comerciais, nos quais os usuários têm acesso limitado ao código por meio de funções pré-definidas aos usuários. O OpenFOAM é escrito na linguagem orientada a objetos em C++ e as hierarquias de suas classes não são fáceis de entender. Assim sendo, os usuários precisam entender o código para compreender as suas funções básicas, e muito cuidado deve ser tomado ao modificar o código.

O fluxograma da metodologia numérica é mostrado na Figura 3.1, onde os elementos com fundo escuro referem-se a aqueles modelos nos quais houve trabalho na confecção de malha e alterações de formulação e de código. Cabe salientar que na etapa de Formulação Matemática são apresentados os modelos já implementados anteriormente no OpenFOAM e os modelos desenvolvidos nesta tese, capazes de representar o comportamento do *spray* e da combustão dentro de uma câmara de combustão. Os novos modelos capazes de representar o comportamento do *spray* e da combustão dentro de uma câmara de combustão revelam a grande relevância deste trabalho, uma vez que são modelos que retratam, respectivamente, a quebra primária do *spray*, as colisões entre as gotas de combustível e a caracterização da combustão turbulenta.

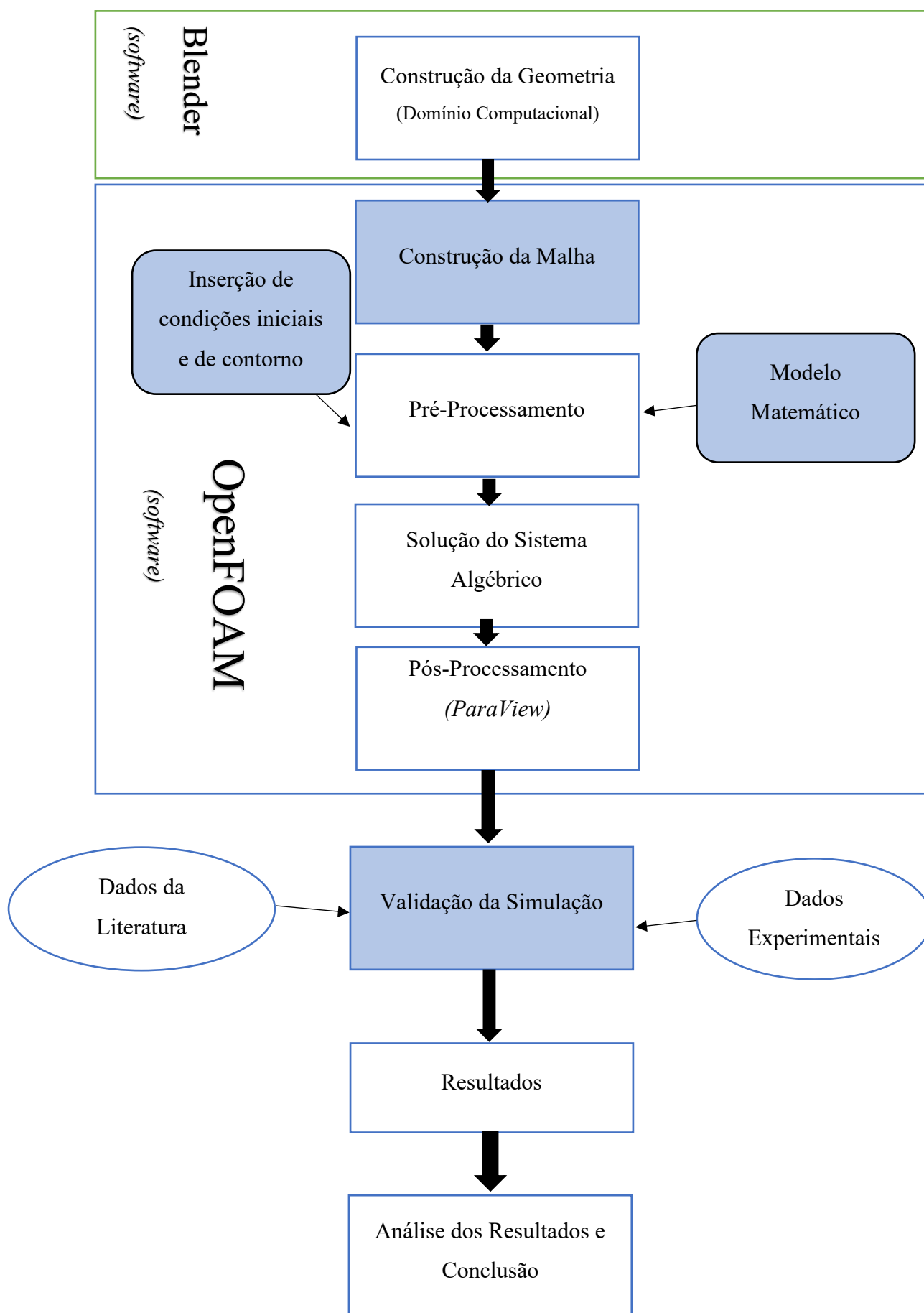


FIGURA 3.1 - Fluxograma da Metodologia Numérica

3.1 INFRAESTRUTURA COMPUTACIONAL

As simulações foram realizadas em dois computadores físicos, Intel I7-4500U CPU @ 2.39GHz e em dois em *Hyper Threading Technology*. Este hiperprocessamento é uma tecnologia da Intel usada para computação em paralela, ou seja, essa tecnologia faz com que cada núcleo (I7 possui até 12 núcleos) do processador possa executar mais de uma tarefa de uma única vez. Segundo a Intel (2019) a *Hyper Threading* oferece um aumento de desempenho de até 30% dependendo da configuração do sistema. Nestas configurações a simulação que mais necessitou de poder computacional levou 7 horas para ser finalizada com 8 núcleos.

3.2 DOMÍNIO COMPUTACIONAL E GERAÇÃO DA MALHA

O domínio computacional deve delimitar uma região fechada no espaço, onde é gerada a malha. Desta maneira, a geometria criada serve como base para a determinação do domínio computacional. A geometria sólida do domínio é muito menos complicada do que a de um motor, desta maneira a ferramenta *blockMesh* do OpenFOAM é adequada para a geração da malha, sem a necessidade de uma geometria CAD. Portanto, para a validação dos modelos matemáticos utilizados para a caracterização do *spray*, o domínio computacional foi simplificado para o formato de um prisma para analisar as rotinas computacionais. Depois de verificar as rotinas computacionais utilizou-se como domínio computacional a câmara de combustão de um motor monocilíndrico de pesquisa. No modelamento do motor, as movimentações das válvulas se mostraram complexas para trabalhar, neste momento, no *OpenFOAM* logo foram desconsideradas.

Para o processo de preparação da geometria e geração da malha no OpenFOAM é apresentado no Apêndice I um roteiro com as rotinas computacionais que foram utilizadas para implementar a metodologia proposta.

3.3 MODELOS MATEMÁTICOS PARA CARACTERIZAÇÃO DO SPRAY E DA COMBUSTÃO.

Na seção 3 do capítulo 2 são apresentados e descritos os diversos modelos matemáticos capazes de caracterizar o *spray* e a combustão para a modelagem

fluidodinâmica. Como a implementação de certos modelos de atomização na versão padrão do OpenFOAM não segue completamente a literatura original, algumas modificações do código foram feitas. Essas modificações são discutidas nesta seção. Na discussão a seguir, os modelos de atomização implementados na versão padrão do OpenFOAM são referidos como os modelos padrão.

3.3.1 Modelo Utilizado para a Primeira Quebra

São utilizados os modelos de Rosin-Rammler (RR), LISA e um inédito modelo desenvolvido nesta tese para modelar a primeira quebra do filme líquido do combustível. A escolha dos modelos RR e LISA está fundamentada, conforme mostrado na seção 2.3.1, no sucesso comprovado por vários pesquisadores ao adotar estes modelos para simular o comprimento de penetração e SMD para pulverizadores de cone oco injetados a pressões variadas. O desenvolvimento do novo modelo buscou simplificar o número de equações em relação aos modelos pré-existentes.

As equações que regem estes modelos são apresentadas e explicadas na seção 2.3.1. Cabe apenas salientar que as constantes utilizadas e pertencente ao modelo de Rosin-Rammler são $r_m=15\mu\text{m}$; $q=2$ e $q=3$. Para o modelo LISA as constantes empregadas foram $C_I=1$; $C_\tau=12$; $Q=0.001$; $J=1.5 \times 10^{-4}$.

O modelo desenvolvido nesta tese para representar a distribuição do tamanho de gotas na primeira quebra parte da premissa que a turbulência do líquido no interior do injetor provoca as primeiras instabilidades de atomização que, em combinação com forças aerodinâmicas, geram a atomização primária do *spray*. Este modelo foi baseado na função de distribuição de Rosin-Rammler, por ser a mais comumente utilizada devido à sua simplicidade. A função de RR é expressa em termos de fração de volume cumulativo e possui apenas dois parâmetros para serem determinados, conforme apresenta a Equação 3.1:

$$Q = 1 - \exp \left[- \left(\frac{D}{X} \right)^q \right] \quad (3.1)$$

Em que Q é a fração de volume do *spray* contendo gotas de diâmetros menores que D , e q e X são constantes. O parâmetro q mede a uniformidade do tamanho das gotas do *spray*, quanto maior é o valor de q , mais uniforme é o *spray*, de modo que se q for infinito as gotas do *spray* serão todas do mesmo tamanho. Cabe ressaltar que na maioria dos *sprays* o valor

de q varia entre 1 e 4. A constante X representa um diâmetro característico do *spray* cuja escolha depende do tipo de problema a ser considerado. Conforme Tabela 2.1 para a aplicação de transferência de massa e reações químicas e físicas deve-se utilizar o diâmetro médio de Sauter (SMD), representado na Equação 3.2:

$$X = D_{32} \left[\Gamma \left(1 - \frac{1}{q} \right) \right] \quad (3.2)$$

Na qual Γ é a função gama e D_{32} é o diâmetro médio de Sauter, definido pela Equação 3.3, conforme Lefebvre (2017).

$$D_{32} = \frac{\sum N_i D_i^3}{\sum N_i D_i^2} \quad (3.3)$$

Em que N_i é o número de gotas tendo diâmetro D_i dentro do *spray*. O SMD é um diâmetro das gotas proporcional à razão entre o volume total e a superfície total das gotas do *spray* e o seu valor depende do tipo de injetor, das propriedades do líquido e das condições de saída do *spray*.

No modelo de RR é considerado um número finito de parcelas de gotas, sendo que cada parcela inclui gotas dentro de uma faixa de diâmetros entrando na câmara de combustão. A fim de simplificar o problema cada parcela de gotas é caracterizada pelo SMD representativo da faixa de diâmetros de gotas dentro da parcela. Posteriormente é calculado um diâmetro máximo, D_{\max} , para cada distribuição de Rosin-Rammler, acima da qual a porcentagem de volume do combustível é menor que 0,1%. Assim, não são consideradas gotas com diâmetros maiores que D_{\max} .

O desenvolvimento nesta tese de um novo modelo que caracteriza a quebra primária de combustível se torna importante visto que este modelo se propõe a descrever o comportamento do *spray* de combustível próximo ao injetor em uma formulação combinada com o consagrado modelo de Rosin-Rammler. Cabe salientar que a abordagem adotada para criar este modelo não foi encontrada em nenhuma referência da literatura e por isso se torna um modelo inédito. Estimou-se que o modelo de turbulência do combustível dentro do injetor provoca as primeiras instabilidades de atomização dentro da câmara de combustão, em combinação com forças aerodinâmicas, gerando a quebra primária. O fundamento deste

modelo é governado por valores de comprimento e tempo característicos, definidos por L_A e τ_A , respectivamente. Desta maneira o diâmetro da gota d_p irá variar de acordo com a Equação 3.4:

$$\frac{d(d_p)}{dt} = -k_1 \frac{2L_A}{\tau_A} \quad (3.4)$$

Em que K_1 é uma constante do modelo. A Equação 3.5 produz uma variação da massa da gota e a redução cumulativa da massa em função do tempo é representada por m_s .

$$m_s(t) = \int_0^t -\frac{d(m_p)}{dt} dt \quad (3.5)$$

Sendo a massa das parcelas das gotas representada por $m_p = \frac{\pi\rho_p(d_p)^3}{6}$. Se a massa das gotas menores for maior que uma determinada tolerância, o modelo fará a quebra das gotas. Esta tolerância é definida pela constante C_1 , conforme a Equação 3.6:

$$C_1 \leq \frac{m_s(t)}{m_p(t)} \quad (3.6)$$

Quando a quebra ocorre, uma nova parcela é criada onde o diâmetro da gota menor, d_p^c , torna-se igual a Equação 3.7:

$$d_p^c = 2L_A \quad (3.7)$$

De acordo com a massa atomizada, m_s , a quantidade de gotas menores na nova parcela gerada, N_p^c , é calculada de acordo com o balanço de massa representado pela Equação 3.8:

$$N_p^c = \frac{N_p m_s}{m_p^c} \quad (3.8)$$

Onde $m_p^c = \left(\frac{\pi}{6}\right)\rho_p(d_p^c)^3$ é a massa da gota menor. De maneira semelhante, o novo diâmetro da gota maior é calculado de acordo com a Equação 3.9.

$$d_p = \sqrt[3]{\frac{6(m_p - m_s)}{\pi\rho_p}} \quad (3.9)$$

Como o fundamento deste novo modelo é governado por valores de comprimento e tempo característicos, tem-se que o comprimento característico da atomização é proporcional ao comprimento característico turbulento, conforme a Equação 3.10:

$$L_A = C_2 L_T \quad (3.10)$$

Onde C_2 é a constante do modelo. O tempo característico da atomização, este é calculado por uma combinação linear do tempo característico turbulento, τ_T , e do tempo relacionado às ondas de superfície geradas pelo combustível no interior do injetor, τ_w , conforme Equação 3.11.

$$\tau_A = C_3 \tau_T + C_4 \tau_w \quad (3.11)$$

Onde C_3 e C_4 são constantes do modelo. O cálculo das grandezas turbulentas L_T e τ_T baseia-se no modelo k- ε de turbulência. Seus valores no início da decomposição da injeção ao são descritos por Baumgarten (2006) nas Equações 3.12.

$$L_T(t) = C_\mu \frac{k(t)^{1,5}}{\varepsilon(t)} = L_{T_0} \left(1 + \frac{0,0828t}{\tau_{T_0}}\right)^{0,457} \quad (3.12)$$

$$\tau_T(t) = C_\mu \frac{k(t)}{\varepsilon(t)} = \tau_{T_0} + 0,0828t$$

As grandezas iniciais de turbulência L_{T_0} e τ_{T_0} são estimadas em função do escoamento dentro do injetor e sua geometria, como pode ser observado na Equação 3.13.

$$L_{T_0} = C_\mu \frac{k_0^{1,5}}{\varepsilon_0} \quad (3.13)$$

$$\tau_{T_0} = C_\mu \frac{k_0}{\varepsilon_0}$$

As demais quantidades iniciais de turbulência são definidas de acordo com a Equação 3.14.

$$k_0 = C_5 \frac{U_i^2}{8 L_i / D_i} \quad (3.14)$$

$$\varepsilon_0 = C_5 K_e \frac{U_i^3}{2 L_i}$$

Sendo C_5 a constante de turbulência do combustível, U_i a velocidade do combustível na saída do injetor, L_i o comprimento do injetor, D_i o diâmetro do bocal e K a constante do modelo. Por fim, o tempo característico em que τ_w é estimado com a teoria da instabilidade de Kelvin-Helmholtz, onde não se levou em consideração a tensão superficial na superfície do combustível injetado. Diante do exposto tem-se o tempo característico representado pela Equação 3.15:

$$\tau_w = L_w \frac{\sqrt{\rho_p / \rho_g}}{\|U_r\|} \quad (3.15)$$

Considerando ρ_p a massa específica da gota, ρ_g a massa específica do gás, U_r é a velocidade relativa entre a gota e o ar. Ainda se tem que L_w é proporcional a L_A , conforme Equação 3.16.

$$L_w = C_6 L_A \quad (3.16)$$

C_6 é considerado a constante do modelo.

Os valores das constantes do inédito modelo estão apresentados na Tabela 3.3. Tais constantes foram obtidas através das interações dos modelos matemáticos apresentados com o intuito de aproximar seus resultados com os dados experimentais.

3.3.2 Modelo Utilizado para a Segunda Quebra

Para a caracterização da segunda quebra três modelos são adotados: TAB, Reitz-Diwakar e KHRT.

O modelo TAB apresenta cinco constantes. No OpenFOAM, os valores padrão dessas constantes são os seguintes: $y_0 = 0$, $y'_0 = 0$, $C_\mu = 10$, $C_\omega = 8$, $We_{crit} = 12$. Entretanto, dois desses valores, $C_\mu=5$ e $C_\omega = 8$, foram determinados por O'Rourke e Amsden (1987) comparando o resultado de seu modelo com soluções teóricas conhecidas. Note que o valor padrão da constante difere do recomendado por O'Rourke e Amsden (1987) e na presente tese adotou-se os valores fundamentados por esses pesquisadores. Os estudos de sensibilidade dos resultados calculados para essas constantes são analisados.

O modelo Reitz-Diwakar apresenta quatro constantes. No OpenFOAM, os valores padrão dessas constantes estão alinhados com a literatura, Reitz e Diwakar (1987). Desta maneira, nenhuma alteração foi realizada.

O modelo Reitz-KHRT envolve seis constantes. No OpenFOAM, os valores padrão dessas constantes são os seguintes: $B_0 = 0,61$, $B_1 = 40$, $C_\tau = 1$, $C_{RT} = 0,1$, $ms_{Limit} = 0,2$, $Weber_{Limit} = 6$. Observe que, conforme demonstrado na seção 2.3.2, valores substancialmente diferentes para B_1 foram usados em diversas simulações. Além disso, Beale e Reitz (1999) ajustaram o valor de $C_\tau = 10$ e $C_{RT} = 0,1$ ao simularem *sprays* de cone oco, o mesmo foi feito no presente trabalho. Deve-se notar também que o valor padrão da constante $ms_{Limit}=0,2$ difere do recomendado por Reitz (1987), ou seja, $ms_{Limit} = 0,03$.

3.3.3 Modelo Utilizado para a Evaporação do Combustível

O coeficiente de descarga, C_d , compara a relação entre a vazão mássica na saída do bocal e a de um bocal ideal, do qual um fluido de trabalho idêntico se expande sob as mesmas condições iniciais e com a mesma pressão de saída. O efeito do tratamento C_d como constante e de variação foi examinado, em termos de sua influência na penetração de líquidos e SMD. Quando C_d é tratado como constante, a velocidade de injeção e a pressão de injeção dependem da taxa de injeção de massa [verificar Equações (2.4) e (2.5)]. Se C_d é permitido variar, por exemplo, se $C_d(t) \dot{m}(t) = \text{constante}$, a velocidade de injeção é constante durante a injeção. Consequentemente, sob estas condições, a pressão de injeção também permanece inalterada.

Diante do exposto, dois casos são considerados: (i) um injetor de *pintle* com uma variável C_d (ou seja, $C_d(t) \dot{m}(t) = \text{constante}$), e (ii) um injetor de *pintle* com uma constante C_d .

3.3.4 Modelo Utilizado para a Penetração

Como a distribuição inicial do tamanho de gotícula na saída do bocal não foi medida experimentalmente, a sensibilidade da saída do modelo para variação dos parâmetros Rosin-Rammler, r_m e q , foi analisada. O efeito da variação do raio Rosin-Rammler, r_m [veja Equação (2.1)], na penetração de líquidos e SMD foi testado para dois modelos diferentes de atomização: o modelo padrão Reitz-Diwakar e VSB2. O fator exponencial de Rosin-Rammler foi tratado como constante em ambos os casos, sendo $q=2$ e posteriormente $q=3$, enquanto o raio de Rosin-Rammler foi estabelecido em $15 \mu\text{m}$.

3.3.5 Modelo Utilizado para a Dispersão das Gotas

O modelo LISA foi o escolhido para caracterizar a dispersão das gotas e as constantes a seguir foram usadas no modelo padrão do OpenFOAM para simular tal processo: $C_1=1$; $C_\tau=12$; $Q=0.001$; $J=1.5 \times 10^{-4}$. Quando o We_g for maior que $27/16$ a Equação 2.17 foi utilizada, tal equação é reescrita a seguir:

$$w = -2v_g k^2 + \sqrt{4v_g^2 k^4 + QU^2 k^2} - \frac{\sigma k^3}{\rho_f} \quad (3.17)$$

Caso Weg seja menor que 27/16 a Equação 2.21 passa a ser vigente, conforme Equação 3.18:

$$w = \sqrt{\frac{QU^2 k}{h} - \frac{\sigma k^2}{\rho_f h}} \quad (3.18)$$

3.3.6 Modelo Utilizado para a Colisão das Gotas

O modelo de colisão implementado no OpenFOAM foi apresentado na seção 2.3.3 e é uma forma modificada do modelo de O'Rourke. Em vez de apenas agrupar pacotes que estão na mesma célula, o algoritmo calcula a trajetória de todos os pacotes que colidem com aqueles que se cruzam no mesmo intervalo de tempo. Assim, as parcelas precisam estar na mesma posição, independentemente da malha. Uma vez que um *spray* simulado pode conter várias milhares de parcelas, o algoritmo calcula se um par de parcelas está indo em direção a um outro par de parcelas. Se eles não estão, eles são considerados como não colidindo e isso reduz a carga computacional do algoritmo.

Neste modelo a distância entre as parcelas é dada pela Equação 3.19 e t_c representa o instante de colisão

$$|P_2(t_c) - P_1(t_c)| = r_1 + r_2 \quad (3.19)$$

A posição dos vetores é representada pela Equação 3.20

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{x}_1 + t_c \mathbf{u}_1 \quad (3.20)$$

$$\mathbf{p}_2 = \mathbf{x}_2 + t_c \mathbf{u}_2$$

A equação do modelo apresentado é representada pelas Equações 3.21 e 3.22:

$$|(\mathbf{p}_2) - (\mathbf{p}_1)|^2 = (r_1 + r_2)^2 \quad (3.21)$$

$$|\mathbf{p}_2|^2 - 2\mathbf{p}_2\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_1^2 = (r_1 + r_2)^2 \quad (3.22)$$

A Equação 3.21 pode ser simplificada ao adotar $\Delta\mathbf{x}=\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2$, $\Delta\mathbf{u}=\mathbf{u}_1-\mathbf{u}_2$ e $\sigma=r_1+r_2$

Desta maneira a Equação 3.22 pode ser reescrita de acordo com a Equação 3.23.

$$|\Delta\mathbf{x}|^2 + 2(\Delta\mathbf{u}\Delta\mathbf{x})t_c + |\Delta\mathbf{u}|t_c^2 = \sigma^2 \quad (3.23)$$

O menor valor da raiz positiva da Equação 3.23 representa o tempo de colisão entre as gotas, enquanto o maior valor da raiz positiva fornece o tempo de injeção. Sendo os tempos de colisão e partida das gotas, os vetores de posição no instante de colisão, \mathbf{d} , e o tempo de partida, t . A distância percorrida entre estes tempos é dada por $D_{td} = |\Delta\mathbf{u}|(t_d - t_c)$ e este fornece o parâmetro de impacto, que é representado conforme a Equação 3.24:

$$b = \sqrt{\sigma^2 - (D_{td}/2)^2} \quad (3.24)$$

O parâmetro adimensional de impacto B é $B=b/\sigma$. Se $B=0$ ocorre colisão frontal, ou seja, o centro de uma gota colide com o centro de outra gota. Se $B=1$ uma gota colide tangencialmente com outra gota.

3.3.7 Modelo Utilizado para definir a Trajetória das Gotas

O modelo utilizado para definir a trajetória da gota foi o apresentado na seção 2.3.4 não necessitando fazer nenhuma alteração em tal modelo. Desta maneira todas as equações e constantes apresentadas na seção anteriormente mencionada foi utilizada.

3.3.8 Modelo Utilizado para Conservação da Massa

Em motores de injeção direta, devido à atomização dentro da câmara de combustão, termos são adicionados entre as equações de conservação da massa, momento e energia. Desta maneira a conservação da massa é descrita pela equação 3.25

$$S_m = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i) \quad (3.25)$$

sendo S um termo fonte, ou seja, a variação da propriedade mais a criação ou destruição desta, além disso pode-se conter termos difusivos relativos à superfície deste. Para simular a estratificação média do gás não queimado a equação 3.3 foi utilizada.

No presente trabalho o método utilizado para modelar a influência da estratificação da mistura da combustão envolve usar o campo tridimensional $\tilde{f}(\mathbf{x}, t)$ para avaliar as características locais dos produtos de combustão e a velocidade de combustão turbulenta local, como pode ser verificado na equação 3.26.

$$Tb(\mathbf{x}, t) = Tb[f(\mathbf{x}, t)]$$

$$\rho b(\mathbf{x}, t) = \rho b[f(\mathbf{x}, t)] \quad (3.26)$$

$$Ut, \infty(\mathbf{x}, t) = Ut, \infty\{SL[f(\mathbf{x}, t)]\}$$

É importante destacar que a equação 3.17 não pode descrever os efeitos de flutuações turbulentas na composição da mistura sobre as características médias da queima estratificada. Desta maneira, o presente trabalho adotou o método beta-PDF presumível de média ponderada ao lidar com as características médias.

3.3.9 Modelo Utilizado para Conservação da Quantidade de Movimento

O modelo utilizado está representado pela Equação 3.27, onde o termo ρv , em uma análise conservativa, é constituído das tensões e forças de campo nas fronteiras e volume de controle, respectivamente, como pode ser observado na equação 3.27.

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 \frac{v_j \partial(\rho v_i)}{\partial x_j} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \rho F_{V,i} + F_{p,i} \quad (3.27)$$

O termo $F_{p,i}$ é a componente na direção i de uma força de campo externa sobre a espécie j , como a força gravitacional. A contribuição das tensões relativas à pressão, P , inclui termos viscosos que necessitam ser separados para se correlacionar com o teorema de Reynolds.

Para fluidos newtonianos, tem-se uma relação apresentada na equação 3.28, na qual o delta de Kronecker, também representa forças volumétricas e se refere à força de compressão nas duas fases.

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (3.28)$$

Sendo μ a viscosidade dinâmica do fluido.

3.3.10 Modelo Utilizado para Conservação da Quantidade de Energia

A Equação 3.29 representa a conservação de energia.

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial(\rho v_j h)}{\partial x_j} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \tau_{ij} v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial P}{\partial t} + v_i \frac{\partial P}{\partial x_i} - \sum_i \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial x_i} + S_h \quad (3.29)$$

Tendo a entalpia interna e a energia a mesma unidade de massa. Considera-se que o escoamento está na direção do gradiente de temperatura conforme à lei de Fourier.

3.3.11 Modelo Utilizado para a Combustão

Para a caracterização da chama turbulenta utiliza-se o modelo de combustão que explicita os efeitos das reações químicas e turbulentos do escoamento. Nos motores de combustão interna com injeção direta a queima pode ser caracterizada como um modo de combustão de dois estágios. O primeiro modo envolve a propagação de uma chama pré-misturada e são inerentemente mais complicadas que o segundo modo onde envolve a pós-combustão controlada por mistura de produtos de combustão pobre e rica, como resultado da mistura turbulenta.

No presente trabalho, a massa ponderada $\check{P}_f(f)$ é obtida pelo método PDF para a variável b de regressão da combustão e a fração da mistura. A Equação 3.30 representa o modelamento da massa ponderada utilizada.

$$P(b, f) = P_b(b)P_f(f) = [b \delta(1 - b) + (1 - b) \delta(b)] \quad (3.30)$$

Onde $\delta(b)$ é uma função de delta de Dirac. A equação 3.8 baseia-se em duas proposições:

Primeiro, as flutuações na variável de regressão de combustão e a fração de mistura são hipoteticamente independentes. Embora essa suposição seja difícil de fundamentar, ela é amplamente usada, embora alguns estudos recentes tenham identificado problemas decorrentes da correlação entre $\rho b''f''$ e as flutuações. Segundo a variável regressiva PDF $P_b(b)$ é modelada de uma forma que se baseia na abordagem clássica de Bray-Moss-Libby, BML, que é baseada na hipótese de que a probabilidade de encontrar estados intermediários da mistura reagente é muito menor que a unidade em uma chama turbulenta pré-misturada. Salienta-se que a equação 3.8 possui a variável de regressão $b=1-c$ ao invés da variável de progresso de combustão amplamente utilizada c , isso se deve ao fato da equação de balanço para $\check{b}=1-\check{c}$ ser implementada no OpenFOAM. Usando a Equação 3.30 o PDF canônico pode ser determinado pela Equação 3.31.

$$P_f = \left[\int_0^1 \frac{\check{P}_f(\phi) d\phi}{\bar{b} \rho_u + (1-\bar{b}) \rho_b(\phi)} \right]^{-1} \frac{\check{P}_f}{\bar{b} \rho_u + (1-\bar{b}) \rho_b(f)} \quad (3.31)$$

O método mais simples de contemplar os efeitos das flutuações turbulentas na fração de mistura é usar o beta-PDF presumível de média ponderada através da Equação 3.32.

$$\bar{q} = \int_0^1 q(f) \widetilde{P}_f df \quad (3.32)$$

Em que o til e o traço são usados em conjunto para enfatizar o valor médio de Reynolds de uma quantidade estimada de propriedades que refere ao beta-PDF presumido de massa ponderada, conforme a Equação 3.33.

$$\widetilde{P}_f = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)} f^{a-1} (1-f)^{b-1} \quad (3.33)$$

Na qual uma razão de funções gama $\Gamma(z) = \int_0^\infty \eta^{z-1} e^{-\eta} d\eta$ é usada para satisfazer a restrição de normalização de $\int_0^1 \widetilde{P}_f df = 1$. Os parâmetros a e b na Equação 3.11 são avaliados usando a Equação 3.34.

$$a = \check{f} \left[\frac{\check{f} (1 - \check{f})}{\widetilde{f''^2}} - 1 \right] \quad (3.34)$$

$$b = (1 - \check{f}) \left[\frac{\check{f} (1 - \check{f})}{\widetilde{f''^2}} - 1 \right]$$

Como o primeiro e segundo momento do PDF presumido são calculados resolvendo-se as equações de equilíbrio de Favre, o PDF obtido é ponderado em massa.

Uma abordagem mais sofisticada consiste na média de q usando o PDF canônico de acordo com a Equação 3.35.

$$\bar{q} = \int_0^1 q(f) P_f df \quad (3.35)$$

No âmbito do modelo de fechamento de velocidade de chama, a velocidade de combustão turbulenta totalmente desenvolvida é dada pela Equação 3.36.

$$U_{t,\infty} = Au'Da^{1/4} = Au'^{3/4}L^{1/4}SL^{1/2}\kappa_u^{-1/4} \quad (3.36)$$

Onde A é a única constante do modelo de fechamento de velocidade de chama. As flutuações estão relacionadas a velocidade turbulenta $u' = (2\tilde{k}^{1/2})/\beta$, escala de comprimento integral $L = (C\mu^{3/4}\tilde{k}^{3/2})/\tilde{\varepsilon}$, e tempo de rotação Eddy $\tau_t = L/u'$. Finalmente, $\tau_c = \delta_L/S_L$, $\delta_L = \kappa_u/S_L$ e S_L são a escala química do tempo, a espessura da chama laminar e a velocidade da chama laminar, respectivamente.

No presente trabalho, a entalpia condicionada $\overline{h_b}$, a temperatura média de Favre \tilde{T} e a massa específica média de Reynolds $\overline{\rho}$ dentro da chama são avaliadas na estrutura de BML, de acordo com as Equações 3.37, 3.38 e 3.39.

$$\overline{h_b} = \frac{\tilde{h} - \tilde{b}\overline{h_u}}{1 - \tilde{b}} \quad (3.37)$$

$$\tilde{T} = T_u\tilde{b} + T_b(1 - \tilde{b}) \quad (3.38)$$

$$\frac{1}{\overline{\rho}} = \frac{1}{\rho_u}\tilde{b} + \frac{1}{\rho_b}(1 - \tilde{b}) \quad (3.39)$$

A Equação 3.38 é obtida através da média de Favre e da quantidade $q = \frac{1}{\rho}$, desta maneira pode-se concluir que a Equação 3.37 é válida independente das suposições de BML.

No *OpenFOAM* a massa específica é calculada introduzindo um parâmetro de compressibilidade, *psi*, conforme demonstra a Equação 3.40.

$$psi = \frac{1}{R_{spec}T} \quad (3.40)$$

onde $R_{spec} = R^0/W$ é a constante específica do gás em unidades de J/(K.kg). Portanto, a massa específica pode ser calculada de acordo com a Equação 3.41. Cabe salientar que o *OpenFOAM* calcula a massa específica caso a compressibilidade seja conhecida.

$$\rho = p \cdot \rho_i \quad (3.41)$$

Investigou-se na biblioteca padrão do OpenFOAM a temperatura média da Favre, \tilde{T} , e entendeu-se que ela é calculada interpolando o polinômio termodinâmico de JANAF conforme a Equação 3.42.

$$\tilde{h} = \frac{R^0}{W} \left(\sum_{k=1}^5 \frac{a_k}{k} \tilde{T}^k + a_6 \right) \quad (3.42)$$

A entalpia média específica \tilde{h} , J/Kg, é calculada resolvendo a equação de equilíbrio médio relacionado a Favre. A constante universal dos gases está representado por R^0 que vale 8,324 em J/(mol.K). O peso molecular da mistura, W , e os coeficientes a_k pertencentes a Equação 3.42 são calculados usando uma regra de mistura baseada em fatores ponderados de \tilde{b} e $1 - \tilde{b}$ dentro da chama turbulenta, conforme as Equações 3.43 e 3.44. Percebe-se que os conceitos aqui trabalhados são os mesmos utilizados para a dedução da Equação 3.34.

$$\frac{1}{W} = \frac{1}{W_u} \tilde{b} + \frac{1}{W_b} (1 - \tilde{b}) \quad (3.43)$$

$$\frac{a_k}{W} = \frac{a_{u,k}}{W_u} \tilde{b} + \frac{a_{b,k}}{W_b} (1 - \tilde{b}) \quad (3.44)$$

3.4 GEOMETRIA DO MOTOR

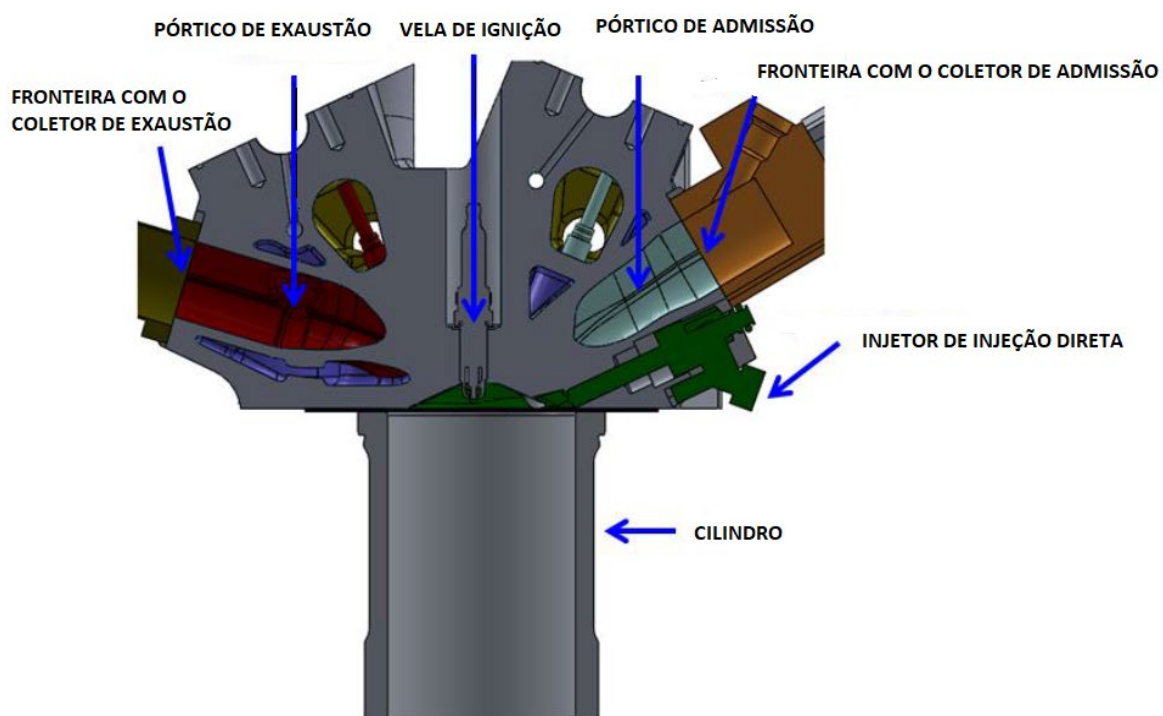
No presente estudo utilizou-se um motor monocilíndrico AVL 5496 que permite operação com injeção direta, cujas características são apresentadas na Tabela 3.1. A Figura 3.2 representa a vista em corte do cabeçote e do cilindro com as regiões dos pórticos e pode-se perceber a posição da vela de ignição e do injetor de injeção direta.

O volume interno de fluido da câmara de combustão e dos pórticos são representados no presente trabalho pela geometria apresentada na Figura 3.3.

Tabela 3.1 – Características do Motor Monocilíndrico

Modelo	AVL 5496
Número de válvulas	4
Tipo de injeção	PFI e/ou DI
Diâmetro do pistão [mm]	82
Curso do pistão [mm]	86
Razão volumétrica de compressão utilizada	11,5:1
Diâmetro das válvulas de admissão [mm]	31,1
Diâmetro das válvulas de exaustão [mm]	28,0
<i>Lift</i> máximo das válvulas de admissão [mm]	10,19
<i>Lift</i> máximo das válvulas de exaustão [mm]	8,82

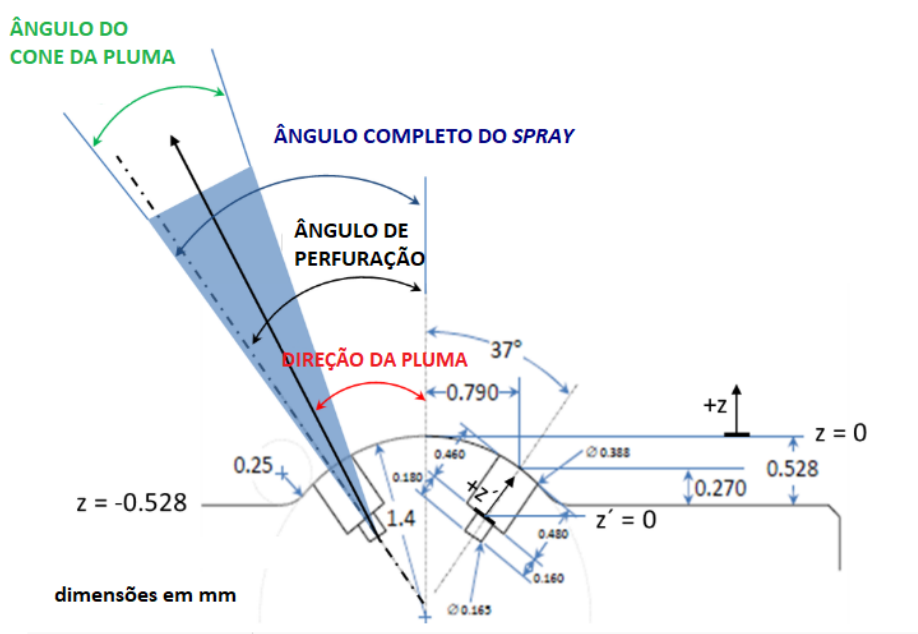
FIGURA 3.2 – Vista em corte do cabeçote e do cilindro do motor monocilíndrico AVL 5496



3.5 CARACTERIZAÇÃO DO INJETOR

Para facilitar o intercâmbio científico aberto sobre o tema de modelagem de *spray* de gasolina da *Engine Combustion Network* (Rede de Combustão de Motores), utilizou-se o *spray-G* da Delphi com a orientação padrão J2715 com $z=0$, $y=0$, $x=0$ definido como a ponta do bico. A Figura 3.5 mostra a geometria do injetor enquanto na Tabela 3.2 apresenta as suas características principais.

FIGURA 3.3 – Geometria do Injetor.



FONTE: adaptado de ECN (2019)

Tabela 3.2 – Características do Injetor *spray* G da Delphi

Número de furos	8
Forma de <i>spray</i>	circular
Ângulo de curvatura	0°
Relação L / D	1,4
Forma do furo	em linha reta
Fabricação	EDM
Quociente de vazão	15 cc/s a 10 MPa
Injetor de combustível	Ativado por solenoide Delphi
Tipo de bocal	Orifício coberto por válvula (VCO)
Forma do bocal	Orifício de passo
Diâmetro do orifício	Especificação de 0,165 mm
Comprimento do orifício	0,16 a 0,18 mm
Passo diâmetro	Especificação de 0,388 mm
Ângulo de perfuração do orifício	37 ° em relação ao eixo do bico
Ângulo de atomização exterior total	80 °

FONTE: adaptado de ECN (2019)

3.6 IMPLEMENTAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO

Como a velocidade experimental do ar é muito baixa, ou seja, em torno de 0,06m/s segundo Hemdal (2009), a velocidade inicial do ar no domínio computacional foi estimada em 0m/s. A energia cinética turbulenta inicial k e a escala de comprimento de turbulência l_t não foram medidas nos experimentos, mas a inicial k e a taxa inicial de dissipação turbulenta $\varepsilon=C\mu/l_t1,5/l_t$ são parâmetros de entrada necessários para o modelo $k - \varepsilon$. Devido ao movimento lento do ar na câmara de combustão, o k inicial foi estimado em $0,1\text{m}^2/\text{s}^2$, enquanto o inicial ε foi estimado em $10\text{m}^2/\text{s}^3$ para caracterizar a quebra do combustível (conforme Tabela 3.3). Estudos de sensibilidade foram realizados para determinar os valores iniciais de k e l_t devido à incerteza nas estimativas apresentadas.

Os valores das constantes nos modelos de *spray* e combustão, as condições iniciais e de contorno usadas na presente tese e outros parâmetros numéricos 'padrão' usados nas simulações são apresentados na Tabela 3.3. Cabe salientar que outros processos relevantes como a evolução do escoamento médio, balanço de energia, evaporação de gotículas,

interação parede-*spray*, turbulência e mistura turbulenta e ignição por centelha foram abordados usando modelos implementados na versão padrão do OpenFOAM.

Tabela 3.3 – Condições de Simulação.

	TIPO	NOME	CONSTANTES
Modelos Matemáticos	Injetor	Injetor Pintle	$d_{inj}=4\text{mm}$; $d_g=30\mu\text{m}$; $C_d=0.418$
	Primeira Quebra	Rosin-Rammler	$rm=15\mu\text{m}$; $q=2$; $q=3$
		LISA	$C1=1$; $C\tau=12$; $Q=0.001$; $J=1.5E-4$
		Novo modelo	$C1=0.1$; $C2=2$; $C3=1.2$; $C4=0.4$; $C5=5$; $C6=2$; $C\mu=0.09$; $Ke=0.27$
	Segunda Quebra	TAB	$y0=0$; $\dot{Y}0=0$; $C\mu=5$; $C\omega=8$; $We_{crit}=12$
		Reitz-Diwakar	$Cb=6$; $Cb=0.785$; $Cstrip=0.5$; $Cs=40$
		KHRT	$B0=0.61$; $B1=40$; $C\tau=10$; $Crt=0.1$
	Turbulencia	k- ϵ (padrão)	$C\mu=0.09$; $C1=1.44$; $C2=1.92$; $C3=-0.33$; $\sigma_k=1.0$; $\sigma_\epsilon=1.3$; $Pr_t=1.0$
Evaporação	padrão		
Combustão Turbulenta Estratificada	Fechamento da velocidade de chama mais a suposta beta-PDF	$A=0.5$	
	Condições de Contorno	Tipo de Fronteira	Modelo Numérico
$K [m^2/s^2]$	1	kqRWallFunction	Gauss limitedLinear 1
$\epsilon [m^2/s^3]$	10	epsilonWallFunction	Gauss limitedLinear 2
T[K]	350	zeroGradient	
p[bar]	6	buoyantPressure	Gauss linear
U[m/s]	0	fixedValue	Gauss limitedLinear V 1
Outros Parâmetros	Elementos Celulares	630.000	
	Ângulo do spray cônico	ângulo do cone interno 37°	
		ângulo do cone externo 60°	
	Intervalo de tempo	5 μs	
	Número Máximo de Courant	0.5	
	Malha (volume característico: m ³)	0.977	
	Balanco de Energia	Equações de duas entalpias	
	Transferência de Calor	RanzMarshall	
Ignição	Step function	Força de Ignição: 16; Diâmetro da ignição 3mm	
Química	Mecanismo químico de Chalmers para substituto de gasolina		

3.7 MODELO DE IGNIÇÃO UTILIZADO

O modelo simplificado desta tese não pôde representar adequadamente a descarga de alta tensão e corrente entre as folgas do eletrodo e o aquecimento do núcleo de ignição pela corrente. No entanto, como este trabalho se concentra na modelagem da queima estratificada turbulenta, o modelo da ignição simples foi utilizado. Levou-se em consideração que a área de ignição deve ser maior do que o tamanho da célula, para que a ignição possa ser visualizada. Desta maneira, definiu-se que o diâmetro de ignição foi de 3mm.

3.8 ANÁLISE DE INDEPENDÊNCIA DA MALHA

Para aumentar a eficiência computacional de obtenção de resultados realizou-se um teste de sensibilidade de malha. Este teste consistiu em realizar a mesma simulação com

três diferentes tamanhos de elementos, ou seja, volumes finitos e comparar os resultados com parâmetros específicos para escolher uma malha na qual os resultados não tenham alteração com o refinamento dos elementos. Cabe salientar que quanto mais refinada for a malha mais resultados precisos ela terá, mas em contra partida maior será o custo computacional, o que pode inviabilizar as simulações. Desta maneira, procurou-se encontrar uma malha com tamanho aceitável para alcançar os objetivos pretendidos com baixo custo computacional.

Na presente tese a técnica de malha móvel foi adotada considerando que a malha pode ser estendida ou comprimida em uma direção e as bordas mais curtas e longas podem ser alteradas. Ao utilizar malhas não estruturadas, a proporção é considerada uma característica importante da malha. Com o objetivo de estudar a sensibilidade dos resultados CFD três conjuntos de malhas foram geradas com 15, 30 e 45 camadas de grades na zona linear do cilindro. Os resultados obtidos nas simulações foram pouco sensíveis à razão de aspectos da malha e a variável de progresso médio de reação e a pressão no cilindro não foram afetadas pela relação de aspectos da malha, conforme observa-se nos Gráficos 3.1. e 3.2. Enquanto a Tabela 3.4 mostra o número de células, o volume e o comprimento característico para cada uma das três malhas estudadas.

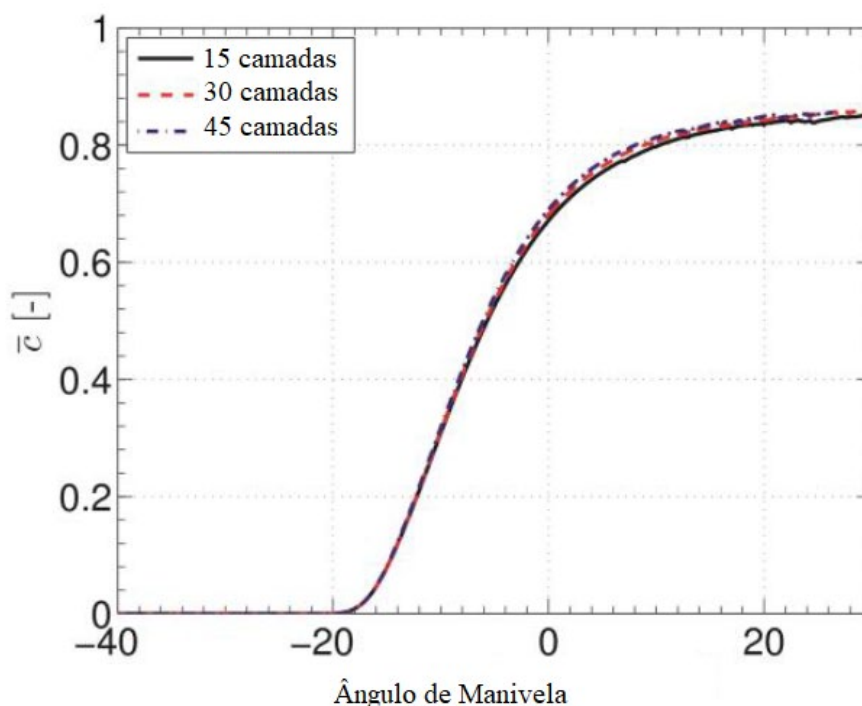


GRÁFICO 3.1 – Impacto da alteração da malha na variável de progresso médio de reação.

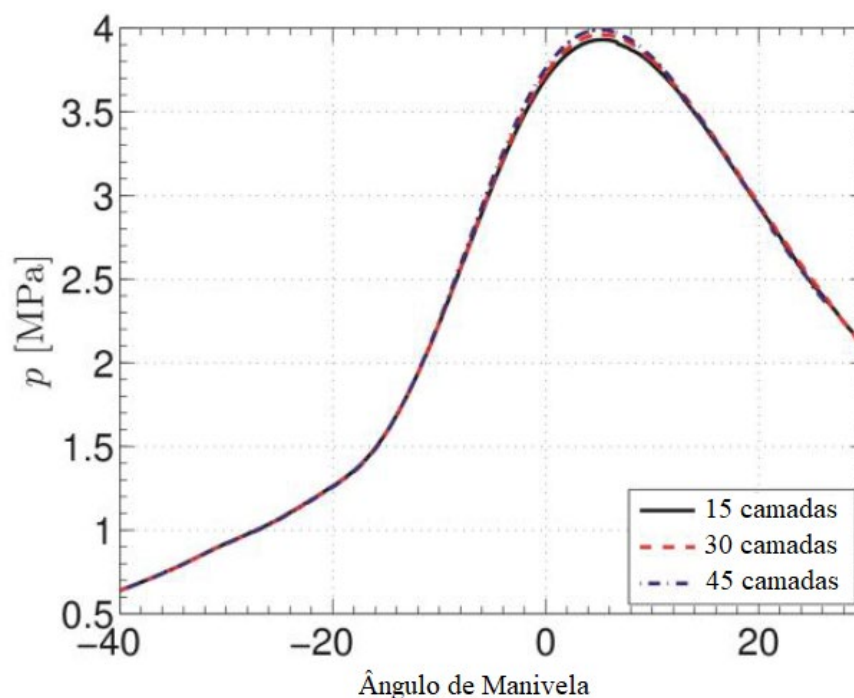


GRÁFICO 3.2 – Impacto da alteração da malha na pressão média do cilindro.

Tabela 3.4 – Número de células, Volume e Comprimento característico da câmara de combustão.

Malha	Camadas	Número aproximado de células	Volume característico [mm ³]	Comprimento característico [mm]
Malha 1	15	630.000	0,977	1,00
Malha 2	30	850.000	0,706	0,90
Malha 3	45	1.200.000	0,520	0,75

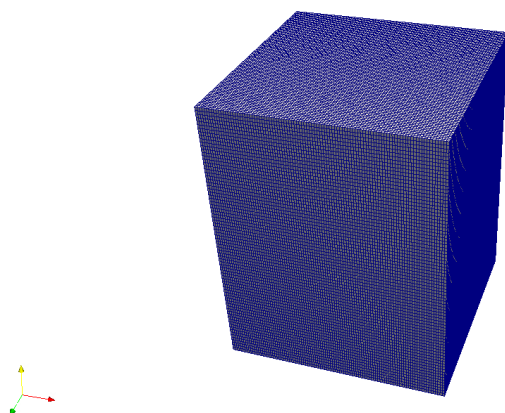
Para a realização das simulações do *spray* e da combustão foi utilizada uma malha não estruturada com 15 camadas. Os Gráficos 3.2 e 3.3 representam o refinamento da malha com os acréscimos de 30 e 45 camadas onde se pode concluir que houve uma variação insignificante, se comparada com a malha de 15 camadas. As características da variável de progresso médio de reação de combustão, \bar{c} , e da pressão no cilindro, não tiveram alteração expressiva com o aumento de camadas na malha, desta maneira para aumentar a eficiência computacional utilizou-se uma malha de 15 camadas onde ela pôde ser estendida ou comprimida para simular a variação do volume do cilindro do motor.

3.9 VALIDAÇÃO DO MODELO

É prática científica a validação inicial do modelo de *spray* por meio da análise da injeção de combustível como um fenômeno isolado em uma câmara quiescente, com volume constante e contra pressão atmosférica ou contrapressões superiores. Essas simulações são conhecidas como análise do *spray* estático em virtude de se tratar do evento de injeção do combustível em uma câmara na qual suas paredes não apresentam deslocamento relativo, como o pistão apresenta dentro do cilindro de um motor de combustão interna. Esse tipo de simulação é importante, pois propicia a validação de modelos para a descrição do *spray* e pode permitir a obtenção de informações sobre características macroscópicas como: a penetração de líquido e a geometria do *spray*, além de informações microscópicas como: a penetração de vapor do *spray*, o diâmetro e a velocidade das gotas.

Para reduzir os custos computacionais, utilizou-se um prisma retangular com a dimensão 40x100x40mm com o tamanho médio das células de 1mm. A forma dessa geometria foi baseada no trabalho de Reis (2015), que testou a sensibilidade da malha para o *spray* de etanol. Este prisma contém 656.100 células hexaédricas não ortogonal e está apresentada na Figura 3.4. Outro detalhe importante é que a direção do *spray* está alinhada com a malha, desta maneira procurou-se garantir que a fronteira do sistema cubra toda a simulação.

Para determinação do tamanho do domínio computacional tem-se que definir um valor limiar, que é tipicamente 90 ou 95% da massa total de combustível injetado, e identificar o volume de espaço contendo essa quantidade de combustível, para posterior definição domínio computacional. A posição da parcela mais distante do injetor dentro daquele espaço é registrada e a projeção do vetor de posição desta parcela no eixo de injeção é considerada a profundidade da penetração do líquido.

FIGURA 3.4 - Domínio Numérico do *Spray*.

Dentro da descrição do problema, define-se o ângulo interno e externo do cone do *spray* para que eles fiquem dentro do domínio numérico do *spray*, dessa forma as parcelas são aleatoriamente e uniformemente distribuídas entre este ângulo. O total de injeção de combustível, temperatura de injeção e pressão de injeção também são definidos nesta etapa, além da necessidade de informar como o combustível será introduzido no sistema. O programa verifica o tempo total de injeção, a massa total de combustível a ser injetado e normaliza a massa média a ser injetada em cada intervalo de tempo, de modo que todos esses parâmetros sejam verificados com a tabela de injeção. Para a validação do modelo foi implementada uma injeção constante de 12,6 g/s durante o tempo de injeção de 1,5ms. Na Tabela 3.5 são apresentadas as condições iniciais para a validação da simulação e o intervalo de tempo foi ajustado para o número máximo de Courant ser de 0,1.

Tabela 3.5 – Condições Iniciais.

Temperatura da Câmara(K)	300
Pressão da Câmara(Pa)	$1,0 \times 10^5$
Temperatura de Injeção(K)	320
Pressão de Injeção(bar)	100
Ângulo do cone Interno(°)	40
Ângulo do cone Externo(°)	60,1
Média da Vazão Mássica(g/s)	12,65
Parcelas por Segundo	8.000.000

Para analisar o modelo de Rosin-Rammler, RR, implementado no OpenFOAM, uma comparação com a literatura é mostrada no Gráfico 3.1. O Gráfico 3.3 mostra que os resultados do modelo OpenFOAM concordam com os apresentados por Reis (2015). Ambos indicaram o mesmo comportamento e quase a mesma penetração por tempo, demonstrando que os modelos de simulação de *spray* estão bem implementados.

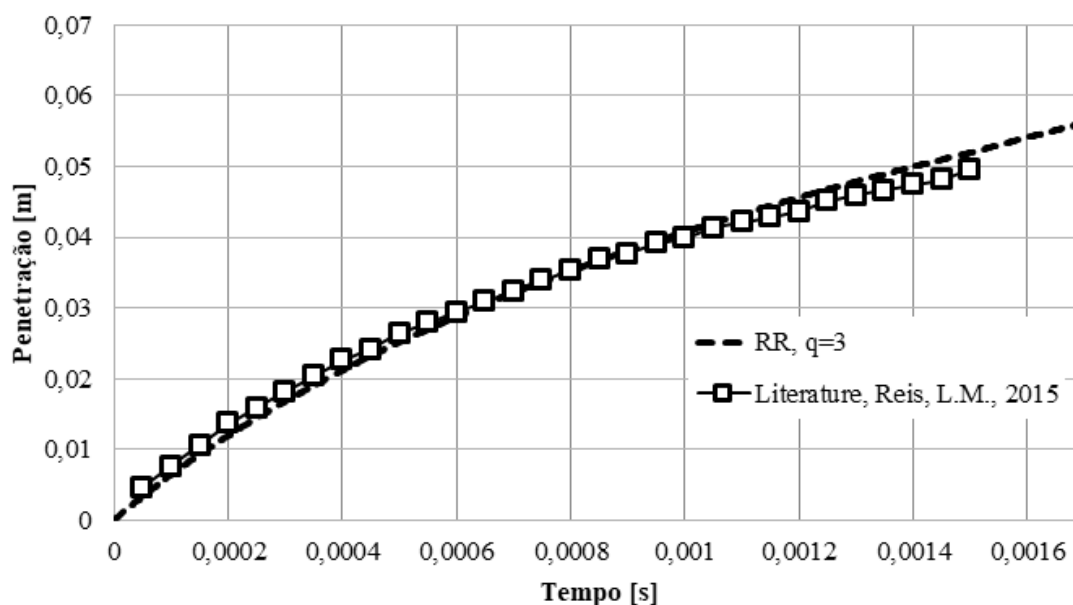


GRÁFICO 3.3 –Penetração por tempo, comparando com a literatura.

3.10 CONSIDERAÇÕES FINAIS DA METODOLOGIA

Na metodologia proposta explicitou-se primeiramente a infraestrutura computacional para a realização da pesquisa e delimitou-se o domínio computacional como sendo a câmara de um motor de combustão interna.

Para analisar o modelo de quebra primário foi detalhado um modelo que se propôs a descrever o comportamento do *spray* de combustível próximo ao injetor. Este estudo é de grande relevância para a comunidade científica visto que existe um número bastante escasso de trabalhos que contempla este tema. O modelo elaborado nesta tese é uma formulação combinada com o consagrado modelo de Rosin-Rammler. Cabe salientar que este tipo de análise não foi encontrado em nenhuma referência da literatura e por isso se torna um modelo inédito. Estimou-se que o modelo de turbulência do combustível dentro do injetor provoca as primeiras instabilidades da atomização dentro da câmara de combustão,

em combinação com forças aerodinâmicas, gerando assim a quebra primária. O fundamento deste modelo é governado por valores de comprimento e tempo característicos.

A metodologia corrente para estudar a modelo de colisão é a desenvolvida por O'Rourke (1981) que em vez de apenas colecionar pacotes que estão na mesma célula, o algoritmo calcula a trajetória de todos os pacotes e colide com aqueles que se cruzam no mesmo intervalo de tempo. Este procedimento reduz o tempo de simulação e é amplamente utilizado pela sociedade acadêmica. No entanto, com o intuito de ter um ganho computacional, o modelo foi modificado e essa modificação se baseia no parâmetro de impacto das gotas em colisão e nos dados da velocidade e posição das parcelas, que simplificam o modelo. Desta forma, o modelo elaborado é similar ao modelo de O'Rourke, mas acredita-se que as simplificações realizadas nele sejam capazes de manter uma boa representatividade quando comparado com os dados reais do *spray*.

Finalmente, o modelo matemático de combustão implementado no OpenFOAM considera a combustão completa, ou seja, a combustão ocorre quando existe oxigênio suficiente para consumir todo o combustível, tendo como produto da reação somente CO₂ e H₂O. Desta maneira, estruturou-se um modelo matemático para caracterizar os principais efeitos da combustão incompleta.

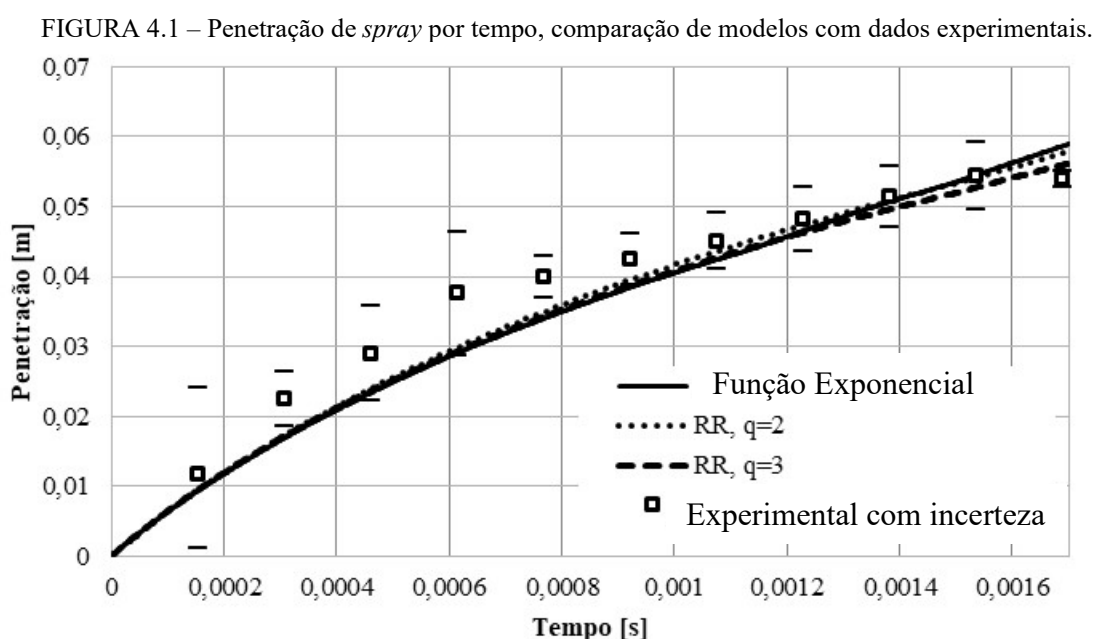
4. RESULTADOS E ANÁLISE

Neste capítulo são apresentados os resultados e suas análises obtidas. Os resultados estão divididos em duas seções, uma relacionada à caracterização do *spray* e outra relacionada à caracterização da combustão. Os parâmetros apresentados para a caracterização do *spray* estão relacionados ao comportamento da penetração do *spray* de combustível, ao diâmetro das gotas e à velocidade relativa dentro da câmara de combustão. Por fim, são apresentados os parâmetros que caracterizam a combustão, sendo os principais a pressão no cilindro, a variável de progresso de reação, a temperatura de combustão e a energia cinética turbulenta.

Estes resultados são comparados com dados experimentais e com resultados da literatura consultada.

4.1 RESULTADOS DA CARACTERIZAÇÃO DO SPRAY

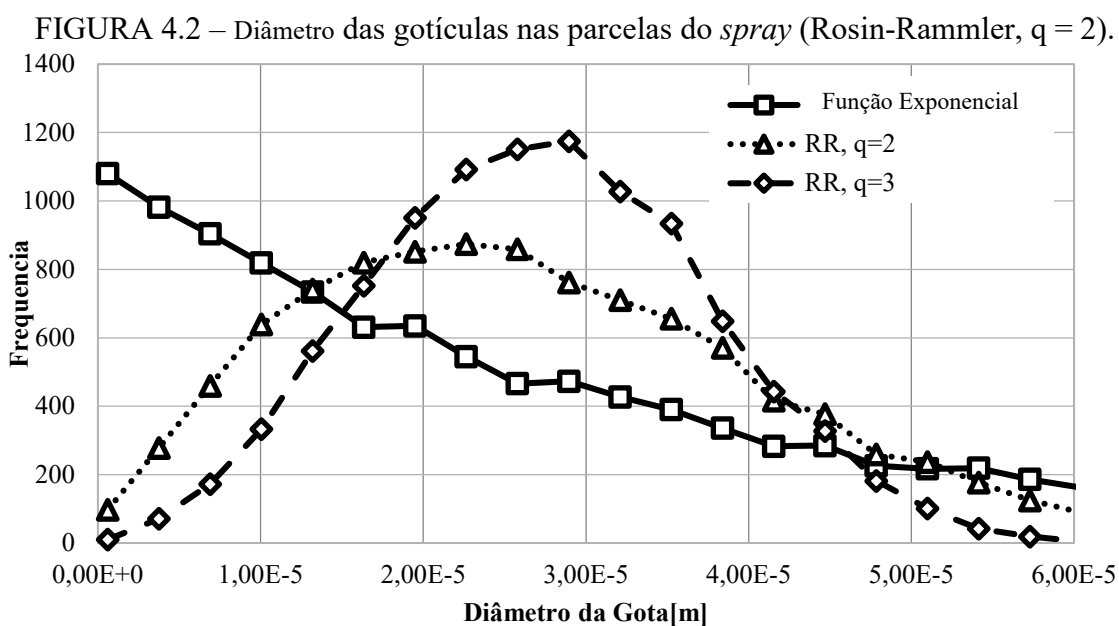
O gráfico representado na Figura 4.1 apresenta as penetrações máximas obtidas nos modelos de injeção de Rosin-Rammler para q igual a 2 e 3 e na função exponencial, além de dados experimentais com incertezas obtidos no CTM.



De forma geral pode ser observada uma concordância dos resultados numéricos com os dados experimentais. No entanto, o comportamento do modelo de função

exponencial indica uma penetração superestimada. A curva dos três modelos apresenta uma subestimação da penetração na região entre 0,3 e 0,9 ms, principalmente se comparado com o comportamento experimental do *spray* que apresenta uma pré-pulverização. Este pré-*spray* não é modelado, conseqüentemente, os resultados numéricos devem apresentar diferenças com relação aos dados experimentais.

O gráfico representado na Figura 4.2 apresenta os resultados da distribuição inicial de gotas para o *spray* de etanol. Este gráfico representa as diferentes abordagens das funções PDF usadas nos modelos analisados. Como pode ser visto, o comportamento da Função Exponencial e RR, são bem diferentes. O diâmetro das gotículas dominantes em ambos os casos é diferente, já que na função exponencial o pico de frequência é próximo de zero e a função do RR está próxima de $30\mu\text{m}$ ou $20\mu\text{m}$, dependendo da variável q . Essas diferenças, como esperado, podem ser atribuídas ao tipo de abordagem que cada modelo matemático adota.



As Figuras 4.3, 4.4, 4.5 e 4.6 mostram os resultados dos diâmetros das gotículas nas parcelas do *spray* no tempo de 1,6 milissegundos depois do início da injeção de combustível. A Figura 4.3 apresenta o comportamento do diâmetro das gotas de combustível ao adotar o modelo Rosin-Rammler para q equivalente a 2. Observa-se que o diâmetro das gotas no final do *spray*, de maneira geral, é menor que do restante do escoamento. Este fato pode ser justificado devido às interações do *spray* de combustível com o ar dentro do cilindro do motor. A Figura 4.4 caracteriza o diâmetro das gotas de um *spray* segundo o

modelo de Rosin-Rammler para q equivalente a 3. Este modelo apresenta um *spray* com os diâmetros das gotas de combustível com pouca variação, desta forma tem-se um comportamento mais uniforme dos diâmetros das gotas. Ao adotar o modelo da Função Exponencial para caracterizar o diâmetro das gotas de combustível no *spray* tem-se um comportamento parecido quando utilizado o modelo Rosin-Rammler para $q=2$, conforme Figura 4.5. Acredita-se que estes modelos são similares devido às características de quebra fornecida pelo modelo. Pois o diâmetro médio é um parâmetro que fornece uma avaliação sobre a qualidade da quebra e não fornece informação sobre a gota em si. A Figura 4.6 representa os diâmetros das gotículas nas parcelas do *spray* para o modelo desenvolvido nesta tese. Neste modelo desenvolvido tem-se um comportamento mais uniforme dos diâmetros das gotículas de *spray* ao longo de todo o comprimento percorrido, acredita-se que essa característica se justifica pela simplificação adotada das equações matemáticas.

FIGURA 4.3 – Diâmetro da Gotícula nas parcelas do *Spray* (Rosin-Rammler, $q=2$).

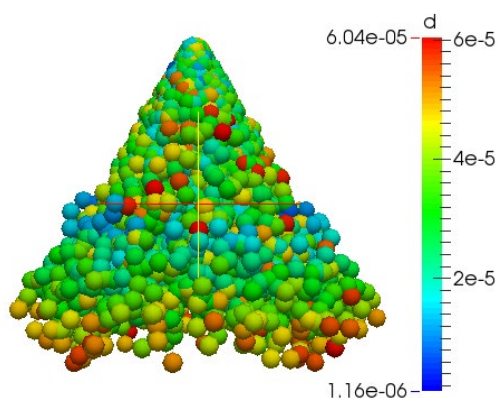


FIGURA 4.4 – Diâmetro da Gotícula nas parcelas do *Spray* (Rosin-Rammler, $q=3$).

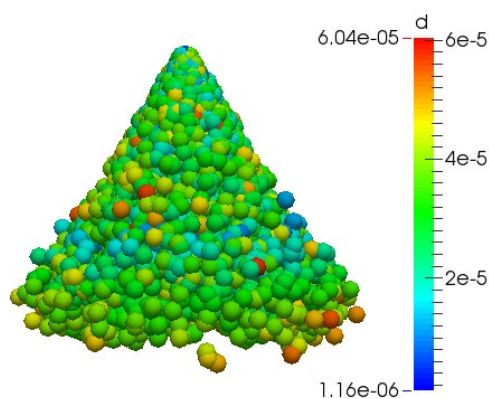
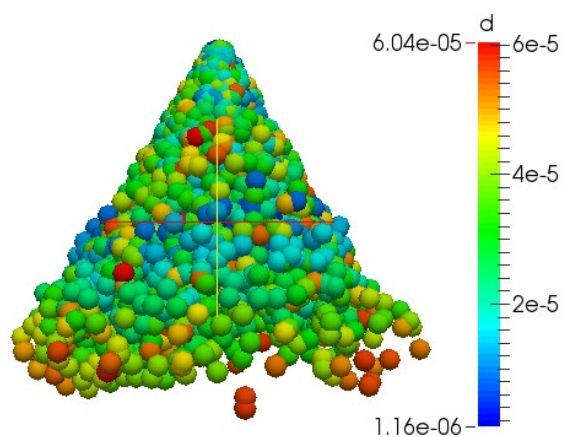
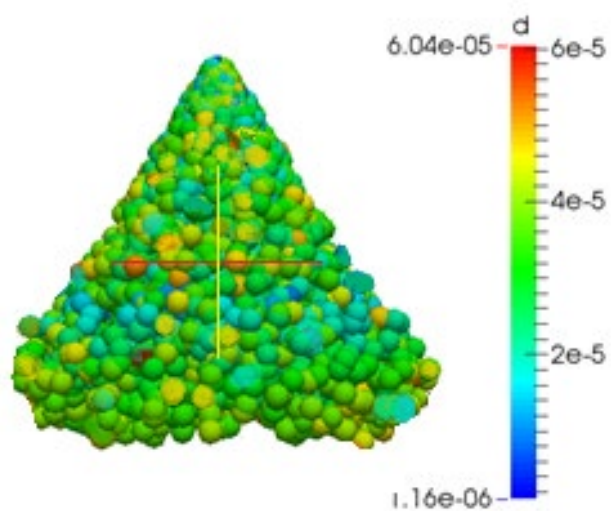
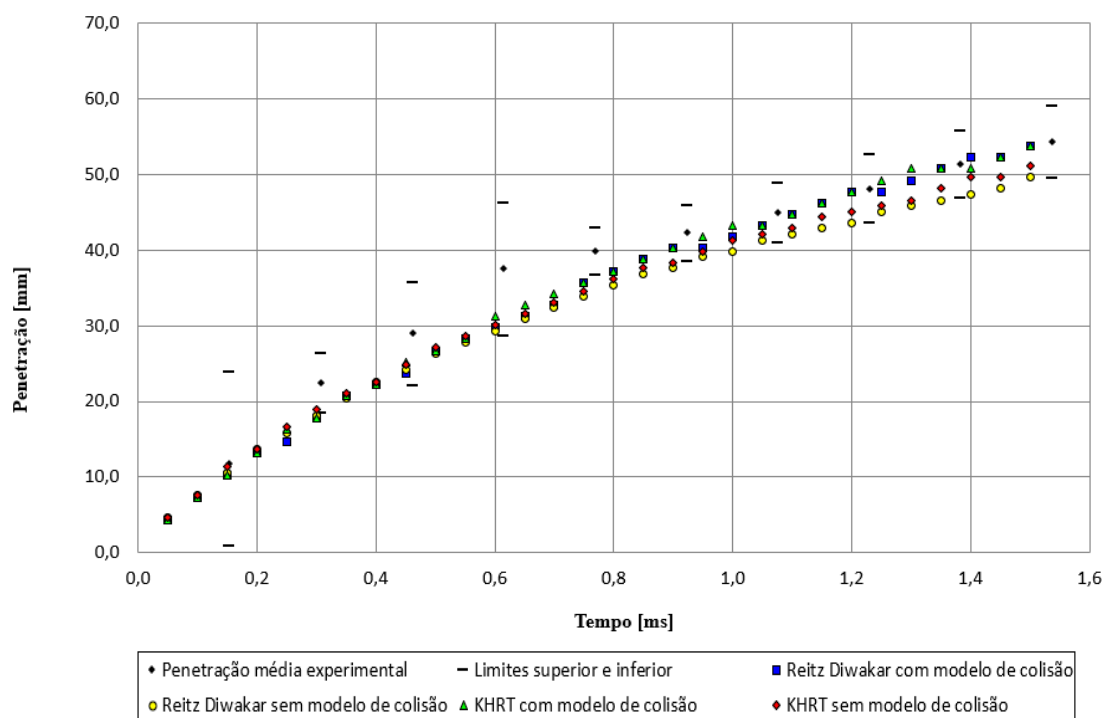


FIGURA 4.5 – Diâmetro da Gotícula nas parcelas do *Spray* (*Função Exponencial*).FIGURA 4.6 – Diâmetro da Gotícula nas parcelas do *Spray* (*modelo desenvolvido pelo autor*).

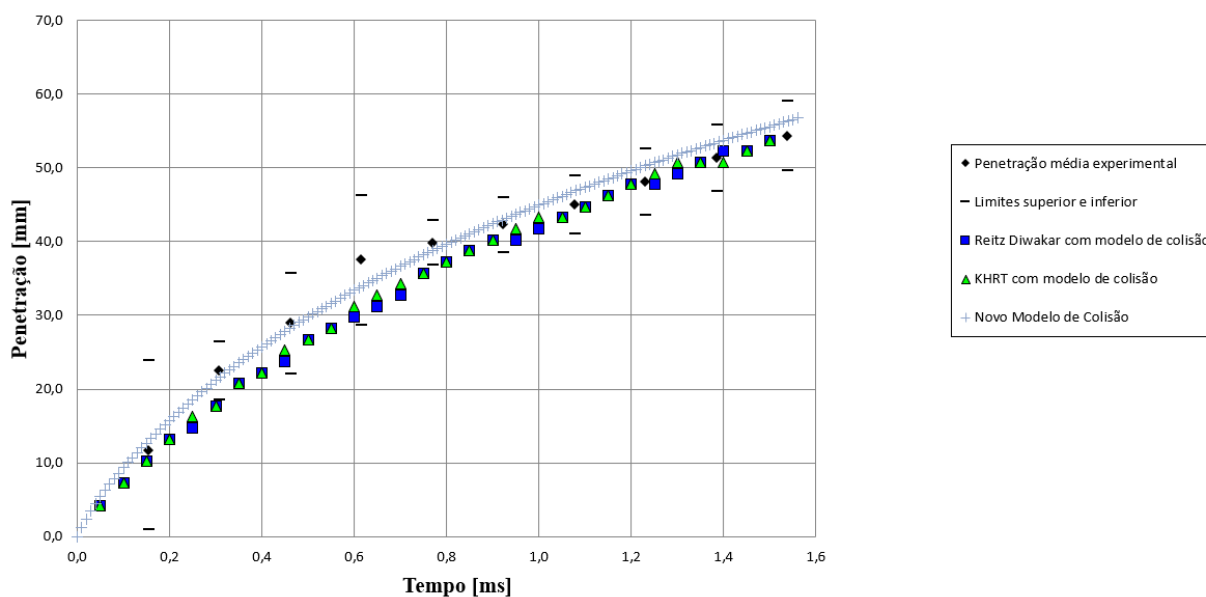
Os gráficos representados nas Figuras 4.7 e 4.8 apresentam a penetração do combustível para os modelos computacionais Reitz-Diwakar e KHRT. Tais modelos foram simulados com e sem o modelo de colisão e comparado com dados experimentais.

FIGURA 4.7 – Penetração por tempo, com colisão nos modelos Reitz-Diwakar, KHRT e no novo modelo desenvolvido.



Como apontado por Baumgarten (2006) as técnicas experimentais para o cálculo da penetração do pré-*spray* está presente em *sprays* produzidos por injetores do tipo *swirl*. Entretanto o modelo numérico não modela a presença desse pré-*spray* e esse fato pode explicar os valores de penetração obtidos experimentalmente estarem um pouco elevados em relação aos valores simulados entre 0,3 à 0,8ms. No cálculo da penetração experimental, um perfil vertical é traçado no centro do *spray*, posição na qual também há presença do pré-*spray*, o que pode influenciar a medida da penetração.

FIGURA 4.8 – Penetração por tempo, com colisão nos modelos Reitz-Diwakar, KHRT e no novo modelo desenvolvido.

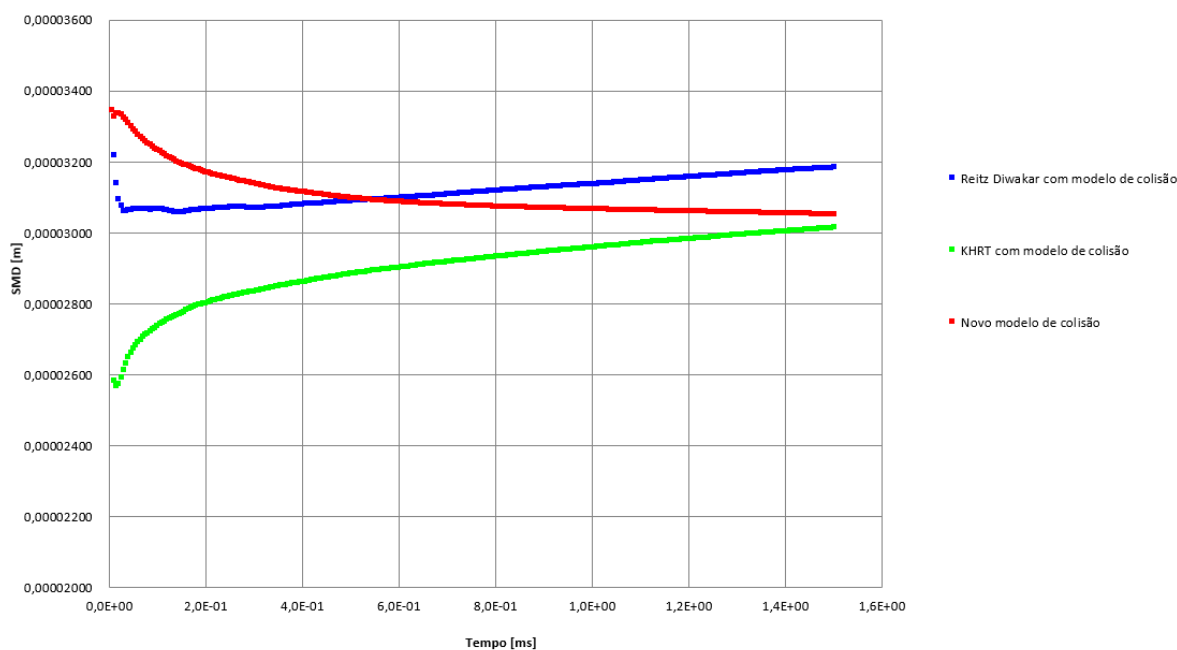


Na Figura 4.8 estão representadas quatro curvas de penetração de *spray* em função do tempo de injeção. Essas curvas são determinadas na simulação com o modelo Reitz Diwakar, o modelo KHRT, bem como o novo modelo de colisão desenvolvido nesta tese e os valores obtidos experimentalmente. Observa-se que todos os pontos dos modelos matemáticos se encontram dentro dos desvios padrões dos dados experimentais e que o novo modelo de colisão apresenta valores superestimados em relação aos dois modelos numéricos e há uma diferença no comportamento dos dados entre o início e o fim da evolução do *spray*. Para os instantes iniciais existe uma inclinação dos dados fortemente ascendente. Para instantes maiores, ou seja, mais próximos ao final da injeção a tendência de crescimento linear é menor.

Acredita-se que a diferença do comportamento entre os instantes iniciais e os instantes mais próximos ao fim da injeção seria a velocidade maior do pré-*spray* relativa ao *spray* principal. Nos instantes iniciais é provável que a inclinação dos dados represente a velocidade do pré-*spray* enquanto para instantes maiores, a inclinação está relacionada com a velocidade do *spray* principal. Isso porque o pré-*spray* se dispersa de tal forma que a concentração de líquido se torna pequena.

O gráfico apresentado na Figura 4.9 representa o comportamento do diâmetro médio de Sauter (SMD) em função do tempo. Neste gráfico, são comparados os resultados obtidos para o modelo Reitz Diwakar, KHRT e o novo modelo de colisão.

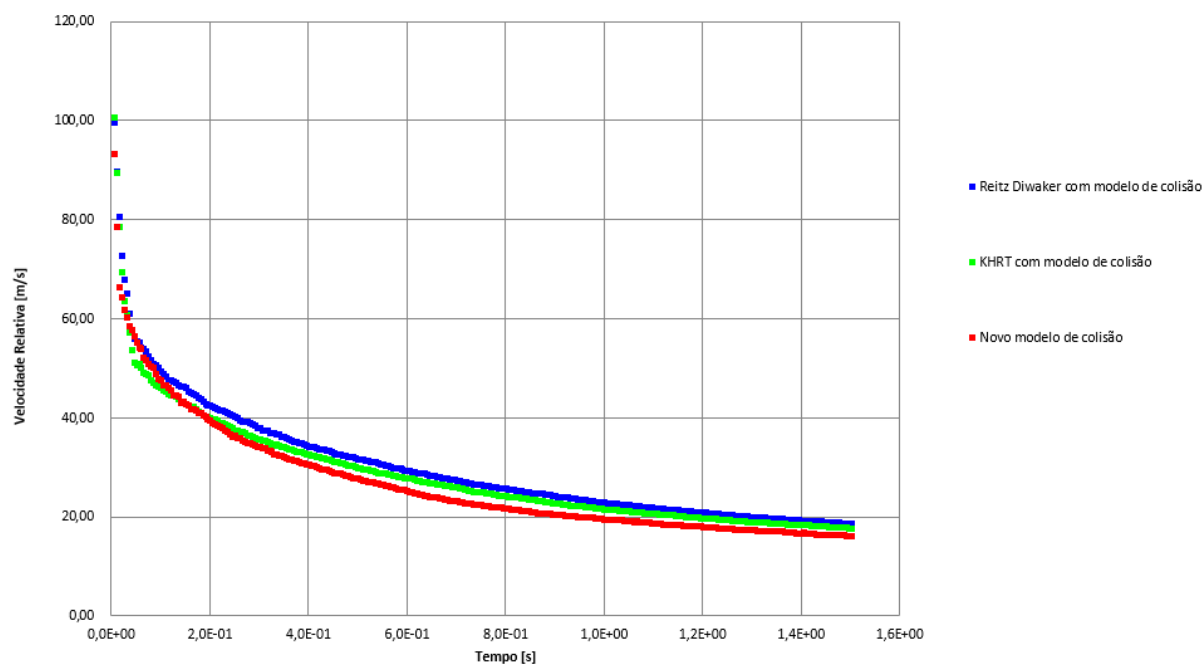
FIGURA 4.9 –SMD em função do tempo, nos modelos Reitz-Diwakar, KHRT e no novo modelo.



É possível verificar que o comportamento do SMD para os modelos Reitz Diwakar e KHRT apresenta um aumento progressivo constante a partir de 0,2ms. Um comportamento diferente é observado no modelo desenvolvido pelo autor, que apresenta uma diminuição do SMD em função do tempo até 0,8ms e posteriormente tende a manter quase constante seu diâmetro médio de Sauter.

O gráfico representado pela Figura 4.10 representa o comportamento da velocidade relativa do *spray* em função do tempo. Neste gráfico são comparados os resultados obtidos para o modelo Reitz Diwakar, KHRT e o modelo de colisão desenvolvido nesta tese. É possível verificar que a partir de 0,2ms, o novo modelo apresentado possui uma velocidade relativa menor que os modelos Reitz Diwakar e KHRT.

FIGURA 4.10 –Velocidade Relativa em função do tempo, nos modelos Reitz-Diwakar, KHRT e novo modelo.



4.2 RESULTADOS DA CARACTERIZAÇÃO DA COMBUSTÃO

O modelo estratificado de combustão turbulenta foi utilizado no OpenFOAM para estudar de modo singular a velocidade de chama laminar, a massa específica e temperatura média, a temperatura de combustão e, por fim, os efeitos das flutuações de turbulência. Em seguida estudou-se e comparou os modelos de combustão já implementados no OpenFOAM.

4.2.1 Resultados da Velocidade de Chama Laminar

A velocidade de chama laminar (S_L) possui relação com o combustível utilizado, com a temperatura dos combustíveis não queimados, com a pressão e com a razão de equivalência. Diante disso, a velocidade de chama laminar é considerada um fator importante para a especificação da taxa de queima turbulenta.

Para estudar o efeito de diferentes aproximações de S_L sobre a taxa de queima global no motor monocilíndrico de injeção direta estudado, foram realizadas quatro execuções nas quais diferentes expressões de S_L foram substituídas na Equação 3.14 para a

velocidade de combustão turbulenta completamente desenvolvida, com todas as outras variáveis sendo mantidas constantes. Nestas simulações, a influência das flutuações turbulentas na composição da mistura e na taxa de queima foi considerada, usando o beta-PDF de Favre, sendo que a massa específica e temperatura médias foram calculadas usando o método BML, representado pelas Equações 3.16 e 3.17. Nos resultados obtidos pode-se observar que diferentes aproximações de S_L produzem resultados similares em termos de taxa de queima e pressão no cilindro sob as condições simuladas. Entretanto, isso não significa que a taxa de combustão não altere a S_L . A taxa de combustão e a pressão no cilindro aumentam substancialmente se a velocidade S_L calculada pela aproximação for duplicada e diminui substancialmente se for reduzida à metade.

Mediante as hipóteses simplificadoras da cinética química adotadas neste trabalho, o campo escalar pode ser representado por um único escalar, denominado como variável de progresso de reação química, c . A evolução da variável de progresso, c , determina a influência da combustão no escoamento, a qual é exercida mediante a variação da massa específica do fluido. É importante observar que os gases não queimados são caracterizados pelos valores da variável de progresso da reação química $c=0$, enquanto os gases queimados são representados pelos valores de $c=1$. Também é relevante comentar que, a taxa de reação química pode ser determinada exclusivamente em função da variável de progresso da reação química, c .

4.2.2 Resultados da Massa Específica e Temperatura média

Na versão padrão do OpenFOAM as expressões usadas para calcular a massa específica média ($\bar{\rho}$) e a temperatura média (\tilde{T}) são as Equações 3.20 a 3.22, que segundo a literatura, não apresentam concordância com resultados experimentais. O método BML, amplamente utilizado, usa as Equações 3.16 e 3.17. As características de queima global calculadas obtidas usando as duas abordagens foram comparadas. Nas condições consideradas neste trabalho, o OpenFOAM produziu uma taxa de combustão ligeiramente maior e uma pressão mais alta do que o método amplamente utilizado BML.

Os resultados da simulação discutidos no restante desta tese foram obtidos usando o método BML, devido esse método ser consagrado na literatura.

4.2.3 Resultados da Temperatura de Combustão

Através da análise CFD observa-se que a temperatura de combustão, T_b , resultante dos cálculos de equilíbrio, é menor do que a combustão completa, ou seja, quando se utiliza a versão implementada no OpenFOAM. Acredita-se que isso aconteça devido os produtos de combustão, proveniente do equilíbrio, conter quantidades significantes de CO formados por dissociação de CO_2 , sendo que este processo não é considerado quando se utiliza a combustão completa.

Constatou-se que a pressão média, p , e a temperatura do cilindro, T , são influenciadas pela diferença nas temperaturas de combustão. Todavia, a temperatura de combustão tem um efeito pouco significativo do que a progressão média de Reynolds, \bar{c} , e acredita-se que isso ocorra porque a variável de progressão é afetada exclusivamente pela massa específica média.

4.2.4 Resultados que Caracterizam as Flutuações de Turbulência

Uma maneira amplamente recomendada pela literatura para modelar a influência de flutuações turbulentas na composição da mistura nas características médias da queima estratificada é baseada na Função de Densidade de Probabilidade, PDF, $P_f(f)$ definida para a fração da mistura. Três abordagens para modelar essa influência foram comparadas em relação aos efeitos das flutuações de turbulência na probabilidade de encontrar produtos da combustão, \bar{c} , e pressão, p , no cilindro. A primeira abordagem analisou a velocidade de chama laminar, S_L , com a temperatura de combustão, T_b , considerando o valor médio de Favre local da fração da mistura, ou seja, não considerando as flutuações de turbulência. Já a segunda abordagem utilizou o Favre beta-PDF usando as Equações 3.11 e 3.12, além da Equação 3.10, usada para calcular a temperatura de combustão local e a velocidade de queima turbulenta. Por fim, a terceira abordagem analisou a função beta-PDF na Equação 3.13 para calcular a média das características locais.

5 CONCLUSÕES

São apresentadas as principais conclusões sobre as metodologias utilizadas na caracterização do spray de combustível e da combustão e dos resultados obtidos em um motor monocilíndrico de injeção direta, ressaltando as principais características e limitações dos modelos desenvolvidos.

5.1 Conclusões sobre as Metodologias Utilizadas

Trabalhar com a geometria da câmara de combustão dentro do OpenFOAM é algo difícil e se tornou inviável, desta maneira utilizou-se um programa complementar, Blender, para facilitar o modelamento em 3D. A manipulação de válvulas móveis no código do OpenFOAM também se mostrou complicada e demorada, desta maneira os estudos apresentados nesta tese foram focados na modelagem do spray de combustível e da combustão.

Pôde-se observar que um ponto negativo do OpenFOAM é que ele não apresenta um editor CAD para a geração da geometria do problema. Porém, ele possui dois utilitários para a geração da malha, que são o blockMesh e o snappyHexMesh. Assim sendo, o OpenFOAM proporciona a introdução de malhas (estruturadas ou não) geradas em outros programas computacionais, comerciais ou gratuitos, convertendo-as para o formato utilizado por ele. Essa é uma importante alternativa devido ao fato de que a maioria dos problemas de engenharia apresentam malhas complexas e não estruturadas e esse tipo de malha é difícil de ser gerada a partir dos utilitários do OpenFOAM.

Conseguiu-se identificar os modelos matemáticos presentes no OpenFOAM que descrevem os comportamentos do spray de combustível e da combustão. Pôde-se observar que o OpenFOAM é escrito na linguagem orientada a objetos em C++ e as hierarquias de suas classes não são fáceis de entender.

A metodologia para o cálculo da penetração do combustível demonstra limitações quando o pré-spray é considerado, mas consegue captar de forma coerente o comportamento *do* spray principal por meio da penetração do diâmetro máximo.

5.2 Conclusões sobre os Resultados Obtidos

Os resultados numéricos são muito importantes para o estudo da injeção direta de combustível, principalmente pela possibilidade de obtenção de dados ao longo de toda a injeção. Além de permitir a análise sequencial de dados detalhados sobre o comportamento do spray. Desta maneira, diversos planos e gráficos podem ser criados para uma análise detalhada do spray gerado pelo injetor. Sendo assim, a modelagem possibilita uma análise de diversos parâmetros que nem sempre podem ser obtidos experimentalmente.

Através da simulação dos modelos que caracterizam o comportamento do *spray* de combustível, concluiu-se que os métodos Rosin-Rammler e Exponencial, alcançaram uma boa curva de penetração, em comparação com os dados experimentais. O modelo Rosin-Rammler foi o que teve melhor ajuste no final da curva, à medida que a curva Exponencial tende a aumentar, portanto, recomenda-se utilizar este método PDF para simulações de *spray*.

Na caracterização da combustão da mistura observou-se que o processo de ignição envolve vários fenômenos, como o acúmulo de uma tensão elétrica e corrente extremamente altas entre os intervalos do eletrodo, a quebra do arco elétrico, o aquecimento da fase gasosa e assim por diante. No entanto, o modelo de ignição implementado na versão padrão do OpenFOAM e usado neste trabalho foi uma função simples que substancialmente simplifica o processo real de ignição. Cabe ressaltar que se optou por esse modelo devido à complexidade encontrada para modelar tais acontecimentos físicos.

A velocidade de propagação da chama é proporcional ao grau de turbulência, isto é, um aumento do grau de turbulência causa um crescimento na velocidade de propagação da chama. Isto ocorre devido a uma maior interação a nível molecular entre a fração de mistura queimada e não queimada, aumentando dessa forma a área de contato entre a mistura não queimada e a frente de chama e conseqüentemente a taxa de reação. A turbulência é resultado da interação entre as forças inerciais do escoamento e a geometria dos condutos de admissão, válvulas, pórticos, câmara de combustão e a cabeça do pistão. Por isso o projeto destes componentes exerce uma significativa influência no grau de turbulência e conseqüentemente da velocidade de propagação da chama e finalmente da eficiência da combustão.

Com as hipóteses simplificadoras das equações de transporte e da cinética química empregadas, as influências da combustão no escoamento são exercidas exclusivamente em função da variação da massa específica do fluido, resultante da expansão

térmica associada às reações químicas. Neste trabalho, estas influências foram determinadas mediante a resolução de uma equação de transporte da variável de progresso da reação química no referencial euleriano.

5.3 Conclusões sobre as modificações dos modelos e as suas limitações

O modelo desenvolvido nesta tese para representar a distribuição do tamanho de gotas na primeira quebra considerou que a turbulência do líquido no interior do injetor provoca as primeiras instabilidades de atomização que, em combinação com forças aerodinâmicas, geram a atomização primária do *spray*. Este inédito e relevante modelo foi baseado na função de distribuição de Rosin-Rammler, por ser a mais comumente utilizada devido à sua simplicidade. O fundamento deste modelo foi governado por valores de comprimento e tempo característicos. Concluiu que o modelo desenvolvido neste trabalho apresentou um comportamento mais uniforme dos diâmetros das gotículas de *spray* no tempo de 1,6 milissegundos depois do início da injeção de combustível. Acredita-se que este comportamento uniforme se deve as simplificações adotadas para caracterizar o comportamento do *spray* de combustível próximo a vela de ignição.

Um novo modelo de colisão foi elaborado nesta tese e implementado no OpenFOAM. Este modelo desenvolvido baseado no parâmetro de impacto das gotas em colisão e nos dados da velocidade e posição das parcelas. Procurou-se desenvolver um novo modelo de colisão capaz de reduzir os custos operacionais, ou seja, tempo de processamento mantendo uma convergência com os notáveis modelos Reitz Diwakar e o KHRT. O novo modelo de colisão apresenta valores superestimados em relação aos dois modelos matemáticos e há uma diferença no comportamento dos dados entre o início e o fim da evolução do *spray*. Para os instantes iniciais existe uma inclinação dos dados fortemente ascendente. Para instantes maiores, ou seja, mais próximos ao final da injeção a tendência de crescimento linear é menor. Foi possível verificar que o comportamento do SMD para os modelos Reitz Diwakar e KHRT apresenta um aumento progressivo constante a partir de 0,2ms. Enquanto o modelo desenvolvido pelo autor apresenta uma diminuição do SMD em função do tempo até 0,8ms e posteriormente tende a manter quase constante seu diâmetro médio de Sauter. Também pode-se concluir que apesar das simplificações empregadas neste modelo não conseguiu validar uma alteração significativa dos tempos computacionais consumidos nesta parte da simulação.

A implementação de um modelo de combustão no OpenFOAM permitiu verificar que a temperatura de combustão resultante dos cálculos de equilíbrio, é menor do que a combustão completa, ou seja, quando se utiliza a versão contida no OpenFOAM. Acredita-se que isso aconteça devido os produtos de combustão, proveniente do equilíbrio, conter quantidades significantes de CO formados por dissociação de CO_2 , sendo que este processo não é considerado quando se utiliza a combustão completa. Pôde-se concluir também que a temperatura de combustão tem um efeito pouco significativo na variável de progresso de reação, demonstrando uma conformidade com o entendimento que a variável de progresso de reação é afetada tão somente pela massa específica.

5.4 Sugestões para Trabalhos Futuros

Como contribuição para a pesquisa e desenvolvimento na área CFD de motores de combustão interna com programa livre, recomenda-se:

- Modificar o OpenFOAM implementando modelos que calculem a temperatura de combustão. Acredita-se que essa contribuição será importante visto que a taxa de formação de NO térmica é altamente sensível à temperatura do produto;
- Simular o comportamento completo do motor monocilíndrico e não somente a câmara de combustão e o pistão no OpenFOAM;
- Desenvolver um novo modelo de ignição que consiga representar o acúmulo de tensão, a corrente elétrica entre os intervalos do eletrodo; a quebra do arco elétrico; o aquecimento da fase gasosa e assim por diante, com o intuito deste fenômeno ficar similar com o comportamento real;

5 BIBLIOGRAFIA

ABRAHAM, J., Bracco, F.V., Reitz, R.D. **Comparisons of computed and measured premixed charge engine combustion**, Journal Combustion Flame 60, 309–322. 1985. [http://dx.doi.org/10.1016/0010-2180\(85\)90036-7](http://dx.doi.org/10.1016/0010-2180(85)90036-7).

AGUERRE, H.J., Nigro, N.M. **Implementation and validation of a Lagrangian spray model using experimental data of the ECN Spray G injector**, Journal Computers and Fluids 190, 30-48, 2019.

ANP. **Gasolina**. Disponível em: <<http://www.anp.gov.br/wwwanp/petroleo-derivados/155-combustiveis/1855-gasolina>> Acesso: 20 fevereiro de 2018.

AMORIM, F. G. L. **Metodologia Numérica Para Caracterização Da Injeção De Combustível E Formação Da Mistura Para Desenvolvimento De Motores De Combustão Interna**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 2016.

AMSDEN, A.A., O'ROURKE, P.J., BUTLER, T.D. **KIVA-II: A computer program for chemically reactive flows with sprays**. LA-11560-MS, Los Alamos national Laboratories, 1989.

ANDREINI, A., BIANCHINI, C., PUGGELLI, S. e DEMOULIN, F.X. **Development of a turbulent liquid flux model for Eulerian–Eulerian multiphase flow simulations**. International Journal of Multiphase Flow 81, 88–103, 2016.

BAI, Y., Wang, Z., Shuai, S., Wang, J. **Three-dimensional numerical simulation of spray, mixed gas formation and combustion process for gasoline direct injection engine**, Combustion Science Technology, 2010.

BAILLY, O.; BUCHOU C.; FLOCH, A. e SAINSAULIEU, L. **Simulation of the Intake and Compression Strokes of a Motored 4-Valve SI Engine with a Finite Element Code**. Journal Oil and Gas Science and Technology- Rev. IFP, VoL 54, No. 2, 161-168, 1999.

BALDWIN, E.T., Grover Jr., R.O., Parrish, S.E., Duke, D.J., Matusik, D.J., Powell, C.F., Kastengren, A.L., Schmidt, D.P. **String flash-boiling in gasoline direct injection simulations with transient needle motion** International Journal of Multiphase Flow 87 90-101, 2016.

BAYVEL, L.P. e ORZECZOWSKI, Z. **Liquid atomization**. Hemisphere Publishing Corporation, 1993.

BAUMGARTEN, C. **Mixture formation in internal combustion engines**. Germany: Springer, 294 p., 2006.

BEALE, J.C. e REITZ, R.D., **Modeling spray atomization with the Kelvin-Helmholtz/Rayleigh-Taylor model**. Atomization *Sprays*, 9: 623-650, 1999.

BEAVIS, N. J. **Numerical Studies Of Gasoline Direct Injection Engine Processes** A Doctoral Thesis submitted in partial fulfilment of the requirements for the award of Doctor of Philosophy of Loughborough University, 2016.

BEAVIS, N. J.; IBRAHIM, S.S.; MALALASEKERA, W., **Numerical Evaluation of Combustion Regimes in a GDI Engine**. *Flow Turbulence Combust* 101:1035-1057, 2018. <https://doi.org/10.1007/s10494-018-9949-8>

BELLMAN, R. e PENNINGTON, R.H. **Effects of surface tension and viscosity on Taylor instability**. *Q Appl Math*; 12: 151-162. 1954.

BONATESTA, F., La Rocca, S., Hopkins, E., Bell, D. **Application of Computational Fluid Dynamics to Explore the Sources of Soot Formation in a Gasoline Direct Injection Engine**, SAE Tech. Pap. 2014, <http://dx.doi.org/10.4271/2014-01-2569>.

BOSCH **Gasoline direct injection as the key to clean and economical engines: reduced fuel consumption and emissions, with enhanced driving dynamics thanks to direct high pressure injection of the fuel into the combustion chamber**, <https://www.youtube.com/watch?v=LjJSbHxIvnM> . 2013. (último acesso setembro de 2017).

BRAY, K.N.C. **Turbulent flows with premixed reactants**, in: P. Libby, F. Williams (Eds.), *Turbul. React. Flows*, Springer-Verlag, Berlin, pp. 115–183, 1980.

BROWN, C. , MCDONELL, V., **Near field behaviour of a liquid jet in a crossflow**. *Proceedings of the ILASS Americas, 19th Annual Conference on Liquid Atomization and Sprays Systems*, Toronto, Canada, 2006.

CATHCART, G., Zavier, C. **Fundamental Characteristics of an Air-Assisted Direct Injection Combustion System as Applied to 4-Stroke Automotive Gasoline Engines**. SAE Technical Papers. 10.4271/2000-01-0256. 2000.

CHIAPINOTTO, L. **Análise da combustão e das emissões de um motor Flex usando misturas heterogêneas de combustíveis**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2017.

CHRYSSAKIS, C.A., ASSANIS, D.N., LEE, J-K., e NISHIDA, K. **Fuel spray simulation of high-pressure swirl-injector for DISI engines and comparison with laser diagnostic measurements**. SAE paper 2003-01-0007, 2003.

CLARK, C.J., e DOMBROWSKI, N. **Aerodynamic instability and disintegration of inviscid liquid sheets**. *Proc R Soc Lond A*; 329(1579): 467-478. 1972.

CORNOLTI, L., Lucchini, T., Montenegro G., D’Errico, G. **A comprehensive Lagrangian flame–kernel model to predict ignition in SI engines** *International Journal of Computer Mathematics*, Vol. 91, No. 1, 157–174, 2014. <http://dx.doi.org/10.1080/00207160.2013.829213>

COSTA, M., Marchitto, L., Merola, S.S., Sorge, U. **Study of mixture formation and early flame development in a research GDI (gasoline direct injection) engine through numerical simulation and UV-digital imaging**, Journal Energy 77, 88–96, 2014. <http://dx.doi.org/10.1016/j.energy.2014.04.114>.

CROWE, C., SOMMERFELD, M., e TSUJI, Y., **Multiphase Flows with Droplets and Particles**. CRC Press LLC. 1998.

DAHMS, R.N., Drake, M.C., Grover, R.O., Solomon, A.S., Fansler, T.D. **Detailed simulations of stratified ignition and combustion processes in a *spray*-guided gasoline engine using the SparkCIMM/G-equation modeling framework**, SAE Int. J. Engines 5, 141–161, 2012. <http://dx.doi.org/10.4271/2012-01-0132>.

DAHMS, R., Fansler, T.D., Drake, M.C., Kuo, T.-W., Lippert, A.M., Peters, N. **Modeling ignition phenomena in *spray*-guided spark-ignited engines**, Proc. Combust. Inst. 32, 2743–2750, 2009. <http://dx.doi.org/10.1016/j.proci.2008.05.052>.

DRAKE, M. C. e HAWORTH, D. C. **Advanced gasoline engine development using optical diagnostics and numerical modeling**. Proceedings of the Combustion Institute. 31 (1), 99–124. Available from: doi:10.1016/j.proci.2006.08.120, 2007.

DOMBROWSKI, N. e JOHNS, W.R., **The aerodynamic instability and disintegration of viscous liquid sheets**. Chem Eng Sci; 18: 203-214.1963.

EPA, United States Environmental Protection Agency. **staff technical report: cost and effectiveness estimates of technologies used to reduce light-duty vehicle carbon dioxide emissions**, www.epa.gov/otaq/climate/420r08008.pdf. 2008. (último acesso setembro de 2017).

ESI GROUP <https://www.openFOAM.com/> (último acesso: janeiro de 2018).

FAJGENBAUM, R. **Influência da temperatura do combustível nos parâmetros de atomização de um atomizador utilizado em bicos injetores automotivos**. Dissertação de mestrado, UNICAMP, 2013.

FAN, L. e REITZ, R. D. ***Spray* and Combustion Modeling in Gasoline DirectInjection Engines**. *Atomization and Sprays*, 10:219-249, 2000.

FARIAS, T. M. **Estudo teórico-experimental do comportamento reológico de fluidos viscoelásticos**. Tese de doutorado, Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia da Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2014.

FAVEIRO, J. L. **Simulação de escoamentos multifásicos polidispersos multivariados**. Dissertação de Mestrado, Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia da Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2014.

FAVEIRO, J. L. **Simulação de escoamentos viscoelásticos: desenvolvimento de uma metodologia de análise utilizando o software *openFOAM* e equações constitutivas diferenciais**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, 2009.

FUREY, R.L. e PERRY, K.L., **Composition and reactivity of fuel vapor emissions from gasoline-oxygenate blends**. SAE Paper 912429. 1991.

GAO, J., HUANG, J.Z. e WANG, X. **Experimental and numerical study of highpressure- swirl injector sprays in a direct injection gasoline engine**. Proc IMechE A; 219: 617-629. 2005.

GINDELE J. **Untersuchung zur Ladungsbewegung und Gemischbildung im Ottomotor mit Direkteinspritzung**. Ph.D. Thesis, University of Karlsruhe, Germany, Logos- Verlag, Berlin, ISBN 3-89722-727-4, 2001.

GIVLER, S.D., Raju, M., Pomraning, E., Senecal, P.K., Salman, N., Reese,R. **Gasoline Combustion Modeling of Direct and Port-Fuel Injected Engines using a Reduced Chemical Mechanism**, SAE Tech. Pap., 2013. <http://dx.doi.org/10.4271/2013-01-1098>.

GOSMAN, A. D. **State of the Art of Multi-Dimensional Modeling of Engine Reacting Flows**. Oil & Gas Science and Technology- Rev. IFP, Vol. 54, No. 2, 149-159, 1999.

GUZZO, M. E. **Desenvolvimento de métodos computacionais para a análise da injeção direta de combustíveis líquidos**. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 2017.

GUZZO, M. E. **Metodologias Para Análise E Caracterização Dos Sprays De Um Injetor De Injeção Direta De Gasolina**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, 2012.

HAN, Z., PARRISH, S., FARRELL, P.V. e REITZ, R.W. **Modeling atomization processes of pressure-swirl hollow-cone fuel sprays**. *Atomization Sprays*, 7: 663-684. 1997.

HARTMANN, G. *Les moteurs et aeroplanes Antoinette*. <http://www.hydroretro.net/etudegh/antoinette.pdf>. 2007. (último acesso: março de 2018).

HAWORTH, D. C. e JANSEN, K. **Large-Eddy Simulation on Unstructured Deforming Meshes: Towards Reciprocating IC Engines**. *Computers fj Fluids*, 29, 493-524, 2000.

HÉLIE, J., Khan,M.M., Gorokhovski, M. **Large eddy simulation of a turbulent spray jet generated by high-pressure injection: impact of the innozzle flow**, *Journal of Turbulence*, 17:9, 823-846, 2016. DOI: 10.1080/14685248.2016.1139120.

HEMDAL, S. DENBRATT, I. DAHLANDER, P. e WARNBERG, J. **Stratified cold start sprays of gasoline-ethanol blends**. *SAE Int J Fuels Lubr*; 2(1): 683-696. 2009.

HEYWOOD, J. B. **Internal combustion engine fundamentals**. 1 ed. New York McGraw-Hill, Inc., 930 p., 1988.

HOMBURG A. **Optische Untersuchungen zur Strahlausbreitung und Gemischbildung beim DI-Benzin-Brennverfahren**. Ph.D. Thesis, University of Braunschweig. Germany, 2002.

HUANG, Y., HONG, G., e HUANG, R. **Numerical investigation to the dual-fuel *spray* combustion process in an ethanol direct injection plus gasoline port injection (EDI+GPI) engine.** *Energy Conversion and Management*, 92, 275-286. 2015.

INTEL. 2019. Disponível em: < <https://www.intel.com.br/content/www/br/pt/architecture-and-technology/hyper-threading/hyper-threading-technology.html> >. (último acesso: agosto de 2019).

IWAMOTO, Y., NOMA, K., NAKAYAMA, O., YAMAUCHI, T., et al. **Development of Gasoline Direct Injection Engine.** SAE Technical Paper 970541, 1997.

JASAK H, Weller H and Nordin N, **In-cylinder CFD simulation using a C++ object-oriented toolkit.** SAE paper 2004-01-0110, 2004.

JOHAN, Z., MORAES, A. C. M.; BUELL, J. C. e FERENCZ, R. M. **In-cylinder cold flow simulation using a finite element method.** *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier Science Limited, 190:3069-3080, 2001.

KHAN, M.M., Hélie, J., Gorokhovski, M., Sheikh, N.A. **Experimental and numerical study of flash boiling in gasoline direct injection *sprays*,** *Applied Thermal Engineering* 123, 377–389, 2017.

KÖSTERS, A., Karlsson, A., Oevermann, M., D'Errico, G., Lucchini, T. **RANS predictions of turbulent diffusion flames: comparison of a reactor and a flamelet combustion model to the well stirred approach,** *Combustion Theory and Modelling*, *Journal Combustion Flame*, 19:1, 81-106, 2015. DOI: 10.1080/13647830.2014.982342.

KRASTEV, V. K., Silvestri, L., Falcucci, G. **A Modified Version of the RNG $k-\epsilon$ Turbulence Model for the Scale-Resolving Simulation of Internal Combustion Engines** *Journal Energies*, 2017. 10, 2116; doi:10.3390/en10122116.

LEFEBVRE, A. H. **Atomization and *Sprays*.** USA: Taylor & Francis, USA, 301 p., 2017.

LEITZ, K.H., PLANKENSTEINER, A., O'SULLIVAN, M., SIGL, L. S. S. **OpenFOAM Modeling of Particle Heating and Acceleration in Cold Spraying.** *Journal of Thermal Spray Technology*, 2018.

LINDH, B. -E. **Scania fordonshistoria 1891-1991** (Scania: vehicle history 1891-1991). Streiffert, 1992.

LIPATNIKOV, A.N., Chomiak, J. **Turbulent flame speed and thickness: phenomenology, evaluation, and application in multi-dimensional simulations,** *Prog. Energy Combust. Sci.* 28, 1–74. 2002. [http://dx.doi.org/10.1016/S0360-1285\(01\)00007-7](http://dx.doi.org/10.1016/S0360-1285(01)00007-7).

LIU, A.B., METHER, D. e REITZ, R.D. **Modeling the effects of drop drag and breakup on fuel *sprays*.** SAE paper 930072, 1993.

LUCCHINI, T., D'ERRICO, G. e NORDIN, N. **CFD modelling of gasoline *sprays*.** SAE paper 2005-24-086, 2005.

KASPER, F. R.S., **Modelagem e simulação de motores à combustão interna por técnicas da fluidodinâmica computacional (CFD)**. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, 2003.

KHAN, M.M., Helie, J. , Gorokhovski, M. **Computational methodology for non-evaporating spray in quiescent chamber using Large Eddy Simulation** International Journal of Multiphase Flow 102, 102-118, 2018.

KIM, T. , Song, J., Park, S. **Effects of turbulence enhancement on combustion process using a double injection strategy in direct-injection spark-ignition (DISI) gasoline engines**, Int. J. Heat Fluid Flow 56, 124–13, 2015. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2015.07.013>.

KIM, Y.; LEE, S. H. e CHO, N. **Effect of Air Motion on Fuel Spray Characteristics in a Gasoline Direct Injection Engine**. SAE Paper, 1999-01-0177, 1990.

KÖSTERS, A. e KARLSSON, A. **A comprehensive numerical study of diesel fuel spray formation with OpenFOAM**. SAE paper 2011-01-0842, 2011.

MA, H. **Optical Diagnostics and Combustion Analysis in a Gasoline Direct Injection Engine**. Thesis, (PhD). University of Oxford, 2006.

MARBLE, F.E., Broadwell, J.E. **The Coherent Flame Model for Turbulent Chemical Reactions**, 1977.

MIGLIACCIO, M., Montanaro, A., Beatrice, C., Napolitano, P., Allocca, L., Fraioli, V. **Experimental and numerical analysis of a high-pressure outwardly opening hollow cone spray injector for automotive engines** Fuel 196, 508–519, 2017.

MILTON, B. E.; BEHNIA, M. e ELLERMAN, D. M. **Fuel Deposition and Reatomisation from Fuelj Air Flows through Engine Inlet Valves**. International Journal of Heat and Fluid Flow, 22:350-357, 2001.

MUGELE, R.A. e EVANS, H.D. **Droplet size distribution in sprays**. Industrial & Engineering Chemistry, v. 43, n. 6, 1317–1324, 1951.

NIGRA JUNIOR, E. L.P. **Análise da influência da temperatura e da pressão de injeção e do tipo de combustível nas características do spray de injetores PFI**. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, 2016.

NISHIYAMA, A.; Le, M.K.; Furui, T.; Ikeda, Y. **The Relationship between In-Cylinder Flow-Field near Spark Plug Areas, the Spark Behavior, and the Combustion Performance inside an Optical S.I. Engine**. Appl. Sci. 9, 1545. 2019.

NKONGA, B. **On the Conservative and Accurate CFD Approximations for Moving Meshes and Moving Boundaries**. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Elsevier Science Limited, 190, 1801-1825, 2000.

NOHIRA, H. **Development of Toyota's direct injection gasoline engine.** In: Proceedings of 27th International AVL Conference 'Engine and Environment', Graz, Austria. AVL LIST GmbH. pp. 239–249, 1997.

NORDIN, N. **Complex chemistry modeling of diesel *spray* combustion.** PhD Thesis, Chalmers University of Technology, 2001.

NOVARESI, V., GARCIA-CAMPRUBI, M., IZQUIERDO, S., et al. **An open-source library for the numerical modeling of mass-transfer in solid oxide fuel cells.** Computer Physics Communications, v.183, n.1, pp.125-146, 2012.

O'ROURKE, P.J., **Collective drop effects on vaporizing liquid *sprays*.** PhD Thesis, Princeton University, 1981

OLSSON, C. Volvo - **Lastbilarna igår och idag** (Volvo - the trucks yesterday and today). Norden, 1987.

O'ROURKE, P.J. e AMSDEN, A.A., **The Tab method for numerical calculation of *spray* droplet breakup.** SAE paper 872089, 1987.

O'ROURKE, P.J. e BRACCO, F.V. **Modeling drop interaction in thick *sprays* and a comparison with experiments.** 9: 101-116; Proc I Mech E 1980.

PATTERSON, M.A. e REITZ, R.D., **Modeling the effects of fuel *spray* characteristics on diesel engine combustion and emission.** SAE paper 980131, 1998.

PARK, S.H., KIM, H.J., SUH, H.K. e LEE, C.S., **Atomization and *spray* characteristics of bioethanol and bioethanol blended gasoline fuel injected through a direct injection gasoline injector.** Int J Heat Fluid Flow 2009; 30: 1183-1192.

PEERY, K. M. **The Heintz Straticharge Engine: modifications I through V.** Department of Mechanical Engineering, Stanford University, 1975.

PERSSON, A. **Description and implementation of particle injection in OpenFOAM.** CFD with OpenSource software, assignment 3. Chalmers University of Technology, 2010.

PETERS, N. **Turbulent Combustion,** Cambridge University Press, Cambridge, 2000. <http://dx.doi.org/10.1017/CBO9780511612701>.

PETROBRAS disponível <<http://www.petrobras.com.br/pt/produtos-e-servicos/produtos/automotivos/etanol/>> (último acesso: março de 2018).

PISCAGLIA, F., Giussani, F., Montorfano, A., Hélieb, J., Aithalc, S.M. **A MultiPhase Dynamic-VoF solver to model primary jet atomization and cavitation inside high-pressure fuel injectors in OpenFOAM** Acta Astronautica 158, 375–387, 2019.

PISCHINGER, F. F. e KLOCKER, K. J. **Single-Cylinder Study of Stratified Charge Process with Prechamber-Injection.** SAE Technical Paper 741162, 1974.

PINCHON, P. **Modelling of Fluid Dynamics and Combustion in Piston Engines.** Revue

de L'Institut Français Du Pétrole, Vol. 46, No. 6, 821-844, 1991.

REIS, L.M. **Análise numérica do *spray* de etanol em câmara atmosférica.** Trabalho de graduação apresentado a Universidade Federal do Estado de Minas Gerais, 2015.

REITZ, R.D. e BRACCO, F.V., **Mechanisms of breakup of round liquid jets.** In: Encyclopedia of Fluid Mechanics, Gulf Pub, NJ 3, 1986.

REITZ, R.D., **Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing *sprays*.** Atomization *Sprays*, 3: 309-337.1987.

REITZ, R.D e DIWAKAR, R., **Effect of drop breakup on fuel *sprays*.** SAE paper 860469, 1986.

REITZ, R.D e DIWAKAR, R., **Structure of high-pressure fuel *sprays*.** SAE paper 870598, 1987.

ROCHA, D. D. **Caracterização Do *Spray* De Etanol Utilizando Técnicas Numéricas De Simulação Com Validação Experimental.** Trabalho de Conclusão de Curso, Universidade Federal de Minas Gerais, Engenharia Mecânica, 2015.

SACOMANO FILHO, F. L. **Simulações de chamas turbulentas de etanol com modelo de turbulência $k-\epsilon$.** Dissertação de Mestrado, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Departamento de Engenharia Mecânica, 2011.

SANTIAGO, M., Irimescu, A., Merola, S.S., Lacava, P., Curto-Riso, P. **Flame Front Propagation in an Optical GDI Engine under Stoichiometric and Lean Burn Conditions,** Journal Energies MDPI, 2017.

SAUER, J., Schnerr, G.H. **Unsteady Cavitating Flow: a New Cavitation Model Based on Modified Front Capturing Method and Bubble Dynamics,** 2000.

SCHÄFER, M. **Computational Engineering – Introduction to Numerical Methods.** Darmstadt: Springer, 2006.

SCHMIDT, D.P., NOUAR, I., SENEAL, R.K., RUTLAND, C.J., REITZ, R.D. e HOFFMAN, J.A. **Pressure-swirl atomization in the near field.** SAE paper 1999-01-0496, 1999.

SENEAL, R.K., SCHMIDT, D.P., NOUAR, I., RUTLAND, C.J., REITZ, R.D. e CORRADINI, M.L., **Modeling high-speed viscous liquid sheet atomization.** Int J Multiphase Flow; 25. 1999.

SHAFARAE, M. e MAHMOUDZADEH, S., **Numerical investigation of *spray* characteristics of an air-blast atomizer with dynamic mesh.** Aerospace Science and Technology 70, p. 351-358, 2017.

SHERMAN, Don. **Explained: Why Some Engines Have Both Port and Direct Injection** <http://blog.caranddriver.com/explained-why-some-engines-have-both-port-and-direct-injection/>. 2017. (último acesso setembro de 2017).

SHIM, Y.S., CHOI, G.M e KIM, D.J. **Numerical and experimental study on hollow-cone fuel *spray* of highpressure swirl injector under high ambient pressure condition.** Journal of Mechanical Science and Technology 22 320~329, 2008.

SILVA, L. F. L. R. **Desenvolvimento de metodologias para simulação de escoamentos polidispersos usando código livre.** Tese de Doutorado, Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia da Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2008.

SPALDING, D.B. **Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames,** Symp. Combust. 13, 649–657, 1971. [http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784\(71\)80067-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784(71)80067-X)

STEVENSON, M. J. e CHEN, X. D. **Visualization of the Flow Patterns in a HighPressure Homogenizing Valve Using a CFD Package.** Journal of Food Engineering, Elsevier Science Limited, 33:151-165, 1997.

SU, T.F., PATTERSON, M.A., REITZ, R.D. e FARRELL, P.V., **Experimental and numerical studies of high pressure multiple injection *sprays*.** SAE paper 960861, 1996.

TAN, J. Y., Bonatesta, F., Kiat, H., Gan, S. **Developments in computational fluid dynamics modelling of gasoline direct injection engine combustion and soot emission with chemical kinetic modelling** Applied Thermal Engineering 107, 936–959, 2016.

TIME, **Detroit's Total Revolution.** Time magazine. [Online], 1979. <http://content.time.com/time/magazine/article/0,9171,947023-4,00.html>. (último acesso: março de 2018).

TRASK, N.A., **Implementation of an Eulerian Atomization Model To Characterize Primary *Spray* Formation.** Tese de Doutorado, Universidade de Massachusetts – Amherst. 2010. Retirado de: <https://scholarworks.umass.edu/theses/434>

VERTEEG, H. K., MALALASEKERA, W. **An Introduction to computational fluid dynamics The finite volume method.** New York: Longman Scientific & Technical, 1995.

WEBER, C. **On the breakdown of a fluid Jet.** Z A M P; 11: 136-159, 1931.

WEISS, M. F. **Design and Prototype Evaluation of a Fuel Control System for the Stratcharge 6 Engine.** Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Stanford, 1979. http://books.google.co.uk/books?id=HTAEAAAIAAJ&q=1973+AMC+Hornet&dq=1973+AMC+Hornet&hl=en&redir_esc=y. (último acesso: março de 2018)

WERNER, A.; ECHTLE, H.; WIERSE, M. **High Performance Simulation Of Internal Combustion Engines.** Proceedings of SC98: High Performance Networking And Computing Conference, Orlando, USA, 1998.

WESTBROOK, C.K., Mizobuchi, Y., Poinso, T.J., Smith, P.J., Warnatz, J. **Computational combustion,** Proc. Combust. Inst. 30, Pág. 125–157, 2005. <http://dx.doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.275>.

XU, Z. *et al.* **Applications of CFD Modeling in GDI Engine Piston Optimization.** SAE International Journal of Engines, vol. 2, no. 1, pp. 1749–1763. JSTOR, 2009. www.jstor.org/stable/26308504.

YANG, S., Reitz, R.D. **Integration of a Continuous Multi-Component Fuel Evaporation Model with an Improved G-Equation Combustion and Detailed Chemical Kinetics Model with Application to GDI Engines,** SAE Tech. Pap., 2009, <http://dx.doi.org/10.4271/2009-01-0722>.

YANG, X., Solomon, A., Kuo, T.-W. **Ignition and Combustion Simulations of *Spray-Guided SIDI Engine using Arrhenius Combustion with Spark-Energy Deposition Model***, SAE Tech. Pap., 2012, <http://dx.doi.org/10.4271/2012-01-0147>.

YASAR, O. **A New Ignition Model for Spark-Ignited Engine Simulations.** Parallel Computing, Elsevier Science Limited, 27:179-200, 2001.

YIN, C., Zhang,Z., Sun,Y., Sun, T., Zhang,R. **Effect of the piston top contour on the tumble flow and combustion features of a GDI engine with a CMCV: a CFD study,** Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics, 10:1, 311-329, 2016. DOI: 10.1080/19942060.2016.1157099.

YI, J. *et al.* **Combustion Improvement of a Light Stratified-Charge Direct Injection Engine.** SAE Transactions, vol. 113, pp. 294–309. JSTOR, 2004. www.jstor.org/stable/44723507.

ZHAO, F.; HARRINGTON, D. L.; LAI, M. C. **Automotive gasoline direct-injection engines.** USA: SAE, 352 p. 2002.

ZHAO, F., LAI, M. -C. e HARRINGTON, D. **Automotive spark-ignited direct-injection gasoline engines.** Progress in Energy and Combustion Science. 25 (5), 437–562. Available from: [doi:10.1016/S0360-1285\(99\)00004-0](https://doi.org/10.1016/S0360-1285(99)00004-0), 1999.

ZHENG, Z., Liu, C., Tian, X., Zhang, X. **Numerical study of the effect of piston top contour on GDI engine performance under catalyst heating mode.** Fuel. 157. 64-72, 2015. <http://10.1016/j.fuel.2015.04.054>.

6 APENDICE I – ROTINA COMPUTACIONAL PARA SIMULAÇÃO DO MOTOR COM OPENFOAM

Neste apêndice é apresentado de forma detalhada a rotina computacional para simulação do motor automotivo utilizando o *software* openFOAM.

Para alcançar o objetivo de desenvolver uma rotina computacional no OpenFOAM três macro etapas devem ser realizadas:

- 1) Preparação da geometria (STL) com o Blender + ferramentas
- 2) Fazer a malha com blockMesh + snappyHexMesh
- 3) Rodar simulação

Passo 1 – Preparação da geometria (STL) com o Blender + ferramentas

Parte 1. a) Blender

Abrir o Blender (pasta “.../Motor_OpenFOAM/Ferramentas) e selecionar o add-on para trabalhar as *patches* da geometria em “File → User preferences → Add-ons → selecionar Import-Export: NW STL format”.

Importar o arquivo da geometria no formato STL em “File → Import → NW Stl”. Lembrar que a geometria STL tem que ter sido salva em formato ASCII. Se tiver em binário o Blender não vai conseguir importá-la.

Separar a geometria em *patches* com nomes bem definidos e lógicos de acordo com a posição no motor. Para fazer isso, clique no nome da geometria no canto direito, escolha “Edit view” no menu inferior e selecione os triângulos da face com “shift + clique direito”, “Ctrl + clique direito”, ou “B”. Se precisar dar zoom, basta apertar “shift + B”.

Com todas as *patches* definidas, exportar o arquivo STL final, lembrando de selecionar todas as *patches* no menu direito. Para isso vá em “File → export → NW Stl” e salve o arquivo STL resultante.

Parte 1. b) moveSTLPoints

Com a geometria pronta, é importante criar um pequeno *gap* entre a cabeça do cilindro e a lateral da válvula da ordem de 0.5 mm, além de mover o pistão até o ponto morto superior.

Isso pode ser feito com a ferramenta `moveSTLPoints` (pasta “.../Motor_OpenFOAM/Ferramentas”). Para mover as válvulas e pistão, deve-se saber o nome das *patches* dos cilindros e pistão, assim como a direção e sentido do vetor normal as superfícies da válvula/pistão. Esses dados podem ser obtidos pelo Blender.

Para utilizar o `moveSTLPoints`, primeiramente será necessário compilar a pasta `moveSTLpoints` em qualquer lugar do sistema Linux. Depois de fazer isso, entre na pasta com o terminal e digite: `wmake`

Feito isso, pode-se usar a ferramenta. A sequência de comandos para usá-la é a seguinte: `moveSTLPoints > geometriaDeEntrada.stl > geometriaDeSaida.stl > arquivoControle`

A geometria de entrada é aquela obtida no blender e a de saída é aquela que será obtida após rodar a ferramenta. No arquivo são definidos as *patches* a mover, a direção de movimento e a magnitude do descolamento em mm.

Parte 2. b) moveEngineSTL

Para preparar todas as geometrias necessárias para o ciclo de funcionamento do motor em intervalos de 5 em 5 ângulos de manivela, a ferramenta `moveEngineSTL` será utilizada.

Nela é necessário dar como *input* a geometria no PMS, a direção das válvulas e do pistão, as *patches* das válvulas e do pistão, os perfis de movimentação das válvulas, e os dados geométricos do motor (curso e comprimento da biela) no arquivo `cycleSplitter`.

Após isso, a ferramenta pode ser chamada pelo comando: `moveEngineSTL cycleSplitter`

Ao fazer isso, a ferramenta gerará uma lista de geometrias começando do -360 até 360 ângulos de manivela, de 5 em 5 graus. As válvulas serão movimentadas de acordo com a sua posição no ciclo do motor.

Passo 2 – Fazer a malha com blockMesh + snappyHexMesh

Parte b. a) blockMesh

Primeiramente, é necessário criar um domínio de malha inicial, na forma de um bloco ou vários blocos retangulares, para definir a resolução de malha inicial para servir de parâmetro ao snappyHexMesh. Para isso é utilizado a ferramenta blockMesh, que já vem pré-compilada no OpenFOAM.

Os parâmetros do blockMesh são definidos no dicionário blockMeshDict, localizado na pasta “Malha → Constant → polyMesh”. Neste arquivo são definidos os vértices do domínio, os blocos que o formarão e a resolução da malha.

Após a definição do blockMeshDict, a ferramenta pode ser chamada pelo comando: blockMesh. Se tudo rodar corretamente, sempre vale a pena verificar a qualidade da malha com o comando: checkMesh. Se nada estiver errado, o checkMesh não acusará nenhum erro. Às vezes, se a definição da posição dos vértices não estiver correta, ele acusará que existem alguns elementos de volume negativo ou qualquer outro tipo de defeito.

Com o blockMesh pronto, o snappyHexMesh poderá ser executado. Para executá-lo, o arquivo snappyHexMeshDict localizado na pasta “system” deverá ser modificado. Nele, todas as *patches* devem ser identificadas logo no início, assim como o arquivo da malha (que deve ser colocado em (“constant/triSurface”). No snappyHexMeshDict os refinamentos de malha em regiões específicas também são definidos. Porém, antes para que essa etapa funcione, a ferramenta surfaceFeatureExtract deve ser executada, lembrando-se sempre de trocar o nome da geometria no arquivo “surfaceFeatureExtractDict”. Assim, após modificar aqueles dicionários de maneira correta, os seguintes comandos devem ser executados:
surfaceFeatureExtract > snappyHexMesh -overwrite.

Porém, o snappyHexMesh pode ser executado em paralelo caso esteja executando em um computador com múltiplos núcleos ou em um *cluster* da seguinte maneira: `mpirun -np "NUMERO DE PROCS" snappyHexMesh -parallel -overwrite`. Antes disso, deve-se definir o "NÚMERO DE PROCS" no arquivo `decomposeParDict` na pasta "system". E após isso executar: `decomposePar`

Se quiser rodar em *background*, salvando o *output* da malha em um arquivo de log, o comando será: `mpirun -np "NUMERO DE PROCS" snappyHexMesh -parallel -overwrite > "NOMEDOARQUIVODELOG" &`

Caso se queira ver como a malha está rodando, e apenas executar o código: `tail -f "NOMEDOARQUIVODELOG"`

Com a malha pronta, todos os elementos estarão salvos na pasta "constant/polyMesh". Pode rodar o `checkMesh` pra checar a qualidade ou verificá-la diretamente no Paraview. Lembrando que se quiser olhar a malha no Paraview com ela ainda decomposta, deve-se abrir o executável pelo comando: `touch "NOME DO EXECUTAVEL DO OPENFOAM"`. Depois disso, pode-se rodar o `paraview`: `paraview`. E abrir o arquivo executável criado anteriormente, lembrando de marcar a opção "Decomposed Case" em Case Type. Se quiser reconstruir a malha, deve-se rodar o comando: `reconstructParMesh`. E assim poderá abri-la com o comando: `paraFoam`.

Parte 3 - Rodar simulação

A primeira coisa é inserir as condições de contorno e condições iniciais, na pasta "Simulacao/0". Para cada uma das propriedades precisa-se inserir as condições de contorno para cada uma das *patches* da geometria, assim como definido nos arquivos.

Com as condições de contorno definidas, precisa-se definir os arquivos na pasta "constant". Lá tem-se os arquivos `chemistryProperties`, onde as propriedades químicas do fenômeno de combustão são inseridas, `combustionProperties`, onde o modelo de combustão é escolhido, `g`, onde a direção da aceleração da gravidade é definido, `radiationProperties`, onde é definido se a radiação será ou não considerada, `thermoPhysicalProperties`, onde as

propriedades termo físicas das espécies consideradas são definidas, `turbulenceProperties`, onde o modelo de turbulência é escolhido/configurado, e o mais importante de todos, `sprayCloudProperties`, onde as propriedades relacionadas ao *spray* são definidas.

A parte mais importante do `sprayCloudProperties`, são as entradas definidas em `subModels`, onde os modelos do *spray* são definidos.

Nos `sprayCloudProperties` escolhe-se os parâmetros relacionados a física do acoplamento gás-liquido e do *spray* em relação a cada orifício do injetor, sendo que cada orifício é representado por modelo diferente, que deverá ser nomeado como for convencional. Por exemplo, se o injetor possuir apenas um orifício, poderá nomeá-lo simplesmente como “modelo”. Mas se existirem múltiplos orifícios, serão necessários vários modelos, “modelo1, modelo2, modelo3...”.

Dentro de cada modelo, deve-se definir o tipo de injetor (se será cônico, hollow-cone, etc), qual será o início da injeção (SOI), a duração da injeção (em segundos), o total de massa a ser injetado, a pressão de injeção, a estratégia para cálculo de velocidade (se por Bernoulli, `pressureDrivenVelocity`, se pelo perfil de vazão mássica, `flowRateAndDischarge`), o diâmetro interno/externo do orifício, a posição e a direção da injeção, o número de *Parcels* (partículas) por segundo e o perfil de vazão mássica pelo tempo.

Além disso, será necessário definir propriedades da distribuição de RosinRammler com o valor máximo e característico das primeiras gotas injetadas e os sub-modelos de injeção, como `BreakUp` (Reitz-Diwakar, KHRT, etc.), transferência de calor (`RanzMarshall`), evaporação (`liquidBoil`), atomização, etc..

No final do documento as constantes de cada modelo são definidas. Outros arquivos importantes estão na pasta “system”. No arquivo `controlDict`, o escoamento de simulação é definido, como o início e término do time-step, tamanho do time-step inicial, uso ou não de timestep ajustável pelo número de Courant, etc...

Na pasta `fvSchemes`, o esquema de discretização de cada um dos termos da equação de Navier- Stokes são definidos, e no `fvSolution` os tipos de solucionadores e tolerância são definidos. Qualquer dúvida de como configurá-lo pode ser consultada no *user guide*.

Se tudo tiver sido configurado corretamente, o domínio poderá ser decomposto com `decomposePar` e a simulação poderá ser executada com `sprayFoam` Ou em paralelo com `mpirun -np "NUM DE PROCS" sprayFoam -parallel > "log.SIMULACAO"`.