

Roberto Ribeiro Schor

**Análise Numérica 3D de Spray de Etanol em
Câmara com Contrapressão**

Brasil

2018

Roberto Ribeiro Schor

Análise Numérica 3D de Spray de Etanol em Câmara com Contrapressão

Dissertação apresentada ao programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG

Escola de Engenharia

Programa de Pós-Graduação em Eng. Mecânica

Orientador: Ramon Molina Valle

Brasil

2018

S374a

Schor, Roberto Ribeiro.

Análise numérica 3D de spray de etanol em câmara com
contrapressão [manuscrito] / Roberto Ribeiro Schor. – 2018.
124 f., enc.: il.

Orientador: Ramon Molina Valle.

Dissertação (mestrado) Universidade Federal de Minas Gerais,
Escola de Engenharia.

Anexos: f. 121-124.

Inclui bibliografia.

1. Engenharia mecânica - Teses. 2. Automóveis - Ignição - Teses.
3. Automóveis - Motores - Combustão - Teses. 4. Automóveis - Motores -
Sistemas de injeção eletrônica de combustível - Teses. I. Valle, Ramon
Molina. II. Universidade Federal de Minas Gerais. Escola de Engenharia.
III. Título.

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

**"ANÁLISE NUMÉRICA 3D DE SPRAY DE ETANOL EM CÂMARA
COM CONTRAPRESSÃO"**

ROBERTO RIBEIRO SCHOR

Dissertação 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 "**Mestre em Engenharia Mecânica**", na área de concentração de "**Energia e Sustentabilidade**".

Dissertação aprovada no dia 21 de fevereiro de 2018.

Por:

Prof. Ramon Molina Valle

Orientador - Departamento de Engenharia Mecânica/UFMG

Prof. Rudolf Huebner

Departamento de Engenharia Mecânica/UFMG

Prof. Sérgio de Moraes Hanriot

Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais

Dedico esse trabalho aos meus pais e minha família

Agradecimentos

Os agradecimentos principais são direcionados à minha mãe, Helozia Schor, e ao meu Pai, Ricardo Schor. Além do apoio incondicional também contribuíram tecnicamente para esse trabalho. Obrigado também ao Ramon Molina pelo tempo, paciência e a liberdade para eu poder trabalhar da melhor forma possível, além dos programas que ele trouxe para a universidade, os quais me incentivaram a continuar no laboratório após a minha graduação. Agradecimentos especiais são direcionados também ao Centro da Tecnologia da Mobilidade (CTM). Esse trabalho não seria possível sem a estrutura do laboratório e a ajuda dos meus colegas.

*“You are not the product of your circumstance
But rather a product of your decisions”
(Stephen Covey)*

Resumo

Devido à preocupação com o meio ambiente as novas regulamentações de emissões automotiva estão cada vez mais restritivas. Conseqüentemente, estão sendo desenvolvidas novas tecnologias para se aumentar a eficiência dos motores de combustão. Uma das tecnologias para tal é a injeção direta, para substituir métodos antigos de injeção do combustível, que melhora dramaticamente a eficiência do motor quando se controla corretamente a combustão. Especialmente nos casos de ignição por compressão ou para estratificação da mistura, é de extrema importância o controle da mistura de ar e combustível. A formação da mistura de ar e combustível e, conseqüentemente a evolução do *spray* e a sua atomização, combinados com a difusão e evaporação desse combustível no ar, juntamente com os movimentos do ar na câmara de combustão são processos muito importantes para controlar e otimizar a combustão. Como o acesso ótico à câmara de combustão é de difícil acesso ou proibitivo, devido aos custos, a técnica mais coerente para se analisar os efeitos do *Spray* na mistura de ar na câmara de combustão é a simulação numérica. O objetivo desta dissertação é desenvolver e validar uma metodologia utilizando a Mecânica de Fluido Computacional (CFD) para modelar e analisar o *spray* de etanol gerado por um injetor automotivo, do tipo *Pressure-Swirl* em uma câmara com contrapressão utilizando o *software* de código aberto OpenFOAM. A metodologia utilizando o *software* OpenFOAM para simular o *spray* foi validada com dados experimentais para valores de contra pressões até 5 bar, para os quais os modelos implementados representam adequadamente o comportamento do *spray* de etanol. Para se determinar o tamanho de gota inicial do *spray* foram empregados os modelos Rosin Rammler e LISA e para descrever o *break up* secundário foram empregados os modelos Diwakar, KHRT e TAB em simulações de *spray* de etanol a pressões de 1 e 5 bar. Uma distribuição de tamanhos de gotas adequada foi determinada para o injetor empregado, e com ótima correlação com os dados experimentais a 1bar. Para o ciclo Otto usual, que até o momento final de injeção de combustível não atinge contrapressões acima de 5 bar, dentre os modelos avaliados nessa dissertação os que melhor representam o comportamento do *spray* ao longo do tempo de injeção são o modelo de atomização LISA em conjunto com o modelo de quebra secundária TAB e o modelo de distribuição de gotas *Rosin-Rammler* em conjunto com os modelos de quebra secundária KHRT ou TAB. Concluindo, para casos usuais de injeção em motores de ignição por centelha os modelos implementados nesse trabalho foram validados a partir de dados experimentais e podem ser utilizados em modelos mais complexos, como por exemplo um próximo passo pode ser a avaliação desse modelo em um domínio com malha móvel, para avaliar o efeito do *spray* na estrutura de fluxo.

Palavras-chave: Spray, OpenFOAM, Break-up.

Abstract

Due to the new regulations in environment laws the new emission standards are increasingly more restrictive. Therefore, new engine technologies has been researched to make the engines more fuel efficient and to decrease the emissions. The direct injection is one of those new technologies, to substitute the old port fuel injection, allowing to improve the control of the cylinder combustion. For this, specially in the cases of stratified strategy or compression ignition engines, the control of the spray injection is very important to control of the air/fuel ratio through the cylinder. The formation of the air fuel mixture, and consequently the evolution of the spray and its atomization combined with the diffusion and evaporation of the fuel in the air together with the charge motion in the combustion chamber are very important for controlling and optimizing the combustion. Since the optical access to the combustion chamber is difficult to access or prohibitive due to costs, the most coherent technique for analyzing the effects of spray in the air mixture in the combustion chamber is the numerical simulation approach. The aim of this dissertation is to develop and validate a Computer Fluid Dynamics (CFD) methodology for modeling and analyzing the ethanol Spray generated by a pressure-swirl automotive injector in a chamber with back pressure utilizing the software OpenFOAM an open source code. The methodology employed to evaluate the ethanol spray pattern with OpenFOAM was validated with experimental data up to 5 bar of vessel pressure. The initial fuel drop size distribution was described by two models, Rosin Rammler and LISA, and the subsequent droplet break up was described by three models, Diwakar, KHRT and TAB for vessel pressures of 1 bar and 5 bar. The droplet mean diameter value was validated with experimental data at 1 bar. For pressures up to 5 bar, among the evaluated models, the optimum models which were able to capture the flow pattern of the ethanol spray are the atomization model LISA with the secondary break up model TAB and the PDF function Rosin Rammler with either KHRT or TAB break-up models. Concluding, for the usual cases of injection in spark ignition engines the models implemented in this dissertation were validated against experimental data and can be utilized in more complex models, e.g. dynamic spray simulation with a moving mesh.

Keywords: Spray, OpenFOAM, Break-up.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Ciclo do Motor Otto	32
Figura 2 – Estruturas do escoamento de ar dentro do cilindro	34
Figura 3 – Motor Junkers de 1914	34
Figura 4 – Comparação esquemática de um motor PFI com um motor DI	35
Figura 5 – Sistemas de injeção de combustível: (Esquerda) PFI (Direita) DI	36
Figura 6 – Posicionamento do injetor na câmara de combustão	37
Figura 7 – Atomização típica de um injetor do tipo <i>Pressure-Swirl</i>	38
Figura 8 – Características de um <i>spray</i>	40
Figura 9 – Tipos do Bico Injetor do Eletroinjetor	41
Figura 10 – Tipos de <i>Spray</i>	41
Figura 11 – Atomização para (a) injetor <i>pressure-swirl</i> de abertura interna (b) injetor <i>pressure-swirl</i> de abertura externa	42
Figura 12 – Diagrama de Ohnesorge: regimes de <i>break-up</i>	43
Figura 13 – Representação dos regimes de <i>break-up</i> do jato do <i>spray</i>	44
Figura 14 – Formas de <i>break-up</i>	45
Figura 15 – Volume de controle discretizado	47
Figura 16 – Volume de controle mostrando as forças superficiais na direção x	49
Figura 17 – Representação do valor médio e da componente flutuante de uma pro- priedade física no escoamento turbulento	51
Figura 18 – Escoamento com e sem cavitação no furo do bico injetor	58
Figura 19 – Modelagem TAB, <i>Taylor-Analogy break-up</i>	59
Figura 20 – Esquema da desintegração de uma lâmina de fluido em gotas	60
Figura 21 – Mecanismo de <i>Break-up</i> KH	64
Figura 22 – Mecanismo de <i>Break-up</i> RT	65
Figura 23 – Mecanismo RT com distância de quebra ativa	66
Figura 24 – O modelo de <i>Drag</i> Dinâmico para a distorção da gota devido ao escoamento	67
Figura 25 – Combustão ocorrendo próximo a uma gota de um combustível	68
Figura 26 – Evaporação de uma gota de um combustível	70
Figura 27 – Infográfico sobre as vertentes das versões do OpenFOAM ao longo dos anos	71
Figura 28 – Taxa de Injeção de Combustível	82
Figura 29 – Domínio utilizado na simulação	83
Figura 30 – Curva de Penetração versus o Tempo de Injeção	84
Figura 31 – Curva de SMD versus o Tempo de Injeção	84
Figura 32 – Visão Lateral do tamanho de elementos do domínio	85
Figura 33 – Curva de Penetração versus o Tempo de Injeção	86

Figura 34 – Detalhe ao final da Curva de Penetração	87
Figura 35 – Curva de SMD versus o Tempo de Injeção	87
Figura 36 – Curva de Penetração versus o Tempo de Injeção	88
Figura 37 – Detalhe ao final da Curva de Penetração	89
Figura 38 – Curva de SMD versus o Tempo de Injeção	89
Figura 39 – Penetração do <i>spray</i> em função do tempo de injeção, calculada com o modelo de Rosin Rammler	92
Figura 40 – Diâmetro das gotas SMD e D10 em função do tempo de injeção em um plano a 8mm do bico injetor, calculado com o modelo de Rosin Rammler	92
Figura 41 – Penetração do <i>spray</i> em função do tempo de injeção, calculada com o modelo LISA	93
Figura 42 – Diâmetro das gotas SMD e D10 em função do tempo de injeção em um plano a 8mm do bico injetor, calculado com o modelo LISA	94
Figura 43 – Penetração do <i>spray</i> em função do tempo de injeção, calculada com o modelo Rosin Rammler	95
Figura 44 – Diâmetro das gotas SMD e D10 em função do tempo de injeção em um plano a 8mm do bico injetor, calculado com o modelo Rosin Rammler	95
Figura 45 – Penetração do <i>spray</i> em função do tempo de injeção, calculada com o modelo LISA	96
Figura 46 – Diâmetro das gotas SMD e D10 em função do tempo de injeção em um plano a 8mm do bico injetor, calculado com o modelo LISA	97
Figura 47 – Penetração 99 % do <i>spray</i> com os modelos LISA e Diwakar	97
Figura 48 – Modelagem do <i>spray</i> com os modelos LISA e Diwakar	98
Figura 49 – Penetração 99 % do <i>spray</i> com os modelos LISA e KHRT	99
Figura 50 – Modelagem do <i>spray</i> com os modelos LISA e KHRT	99
Figura 51 – Evolução do <i>spray</i> determinada com os modelos LISA e KHRT com contrapressões de 1 bar	100
Figura 52 – Evolução do <i>spray</i> determinada com os modelos LISA e KHRT com contrapressões de 5 bar	101
Figura 53 – Penetração 99 % do <i>spray</i> com os modelos LISA e TAB	102
Figura 54 – Variação da forma do <i>spray</i> determinada com os modelos LISA e TAB	102
Figura 55 – Evolução do <i>spray</i> determinada com os modelos LISA e TAB para contrapressão de 1 bar	103
Figura 56 – Evolução do <i>spray</i> determinada com os modelos LISA e TAB para contrapressão de 5 bar	104
Figura 57 – Penetração 99 % do <i>spray</i> com os modelos Rosin Rammler e Diwakar	105
Figura 58 – Variação da forma do <i>spray</i> determinada com os modelos Rosin Rammler e Diwakar	105
Figura 59 – Penetração 99 % do <i>spray</i> com os modelos Rosin Rammler e KHRT	106

Figura 60 – Variação da forma do <i>spray</i> determinada com os modelos Rosin Rammler e KHRT	107
Figura 61 – Penetração 99 % do <i>spray</i> com os modelos Rosin Rammler e TAB . . .	107
Figura 62 – Variação da forma do <i>spray</i> determinado com os modelos Rosin Rammler e TAB	108
Figura 63 – Montagem do aparato experimental	122
Figura 64 – Injetor high-pressure <i>swirl</i> Magneti Marelli IWD3+ 193	122
Figura 65 – Distância da ponta do injetor ao volume de medição do PDA	124

Lista de tabelas

Tabela 1 – Diferença entre a injeção indireta e direta	36
Tabela 2 – Diâmetros médios das gotas e suas aplicações	39
Tabela 3 – Momento em cada face do elemento cúbico	48
Tabela 4 – Vazão do Injetor	81
Tabela 5 – Condições Iniciais e de Contorno Experimentais para Simulação Numérica	82
Tabela 6 – Independência de Parcel	83
Tabela 7 – Resultado Final Independência de Parcel	85
Tabela 8 – Independência de Malha	85
Tabela 10 – Independência do CFL	87
Tabela 9 – Resultado final da independência de malha	88
Tabela 11 – Resultado final da independência de malha	90
Tabela 12 – Características do injetor Magneti Marelli (IWD3+ 193)	121
Tabela 13 – Propriedades dos combustíveis	123

Lista de abreviaturas e siglas

AFR	<i>Air Fuel Ratio</i>
ANL	<i>Argonne National Laboratory</i>
BMEP	<i>Break Mean Effective Pressure</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CFL	Número de Courant Friedrichs Lewy
CTM	Centro da Tecnologia da Mobilidade
DI	<i>Direct Injection</i>
DISI	<i>Direct Injection Spark Ignition</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
E0	Gasolina
E100	Etanol Hidratado
ECN	<i>Engine Combustion Network</i>
EDP	Equações Diferenciais Parciais
EDO	Equações Diferenciais Ordinárias
EOI	<i>End Of Injection</i>
FSC	<i>Flame Speed Closure</i>
FVM	<i>Finite Volume Method</i>
GDI	<i>Gasoline Direct Injection</i>
HCCI	<i>Homogeneous Charge Compression Ignition</i>
KHRT	Modelo Kelvin-Helmholtz / Rayleigh-Taylor
ICE	<i>Internal Combustion Engine</i>
ICEG	<i>Internal Combustion Engine Group</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>

LIEF	<i>Laser Induced Exciplex Fluorescence</i>
LISA	<i>Linearized Instability Sheet Atomization</i>
LTF	<i>Low Temperature Flame</i>
MFB	<i>Mass Fraction Burned</i>
NASA	<i>National Aeronautics and Space Administration</i>
NEDC	<i>New European Driving Cycle</i>
OpenFOAM	<i>Open Field Operation and Manipulation</i>
PDA	<i>Phase Doppler Anemometry</i>
PDF	<i>Probability Density Function</i>
PFI	<i>Port Fuel Injection</i>
PMI	Ponto Morto Inferior
PMS	Ponto Morto Superior
PROCONVE	Programa de Controle de Poluição do ar por Veículos
RANS	<i>Reynolds-averaged Navier–Stokes</i>
ROI	<i>Rate of Injection</i>
SMD	<i>Sauter Mean Diameter</i>
SOI	<i>Start of Injection</i>
TAB	<i>Taylor Analogy Break-up</i>
WOT	<i>Wide Open Throttle</i>

Lista de símbolos

ϕ	Fator que caracteriza a mistura de ar combustível
α	Ângulo de cone de <i>spray</i> [°]
ϵ	Taxa de dissipação dessa energia turbulenta [m^2/s^3]
η_b	Valor máximo da amplitude da onda ω de perturbação [m]
Λ	Comprimento de onda de ω [m]
λ	O inverso de ϕ
μ	Viscosidade dinâmica do fluido [$Pa.s$]
ν	Viscosidade cinemática [$N.s/m^2$]
ω	Amplitude da perturbação da película, ou lâmina, de líquido [m]
ρ	Densidade do fluido [kg/m^3]
σ	Tensão superficial [Pa]
$2h$	Espessura do filme [m]
A	Energia Livre de Helmholtz [J]
a_c	Aceleração [m/s^2]
C_d	Coefficiente descarga
C_D	Coefficiente de arrasto
C_p	Calor específico a pressão constante
C_v	Calor específico a volume constante
d	Diâmetro da gota [μm]
D	Diâmetro representativo da gota [μm]
D_0	Diâmetro do orifício do bico injetor [μm]
D_{10}	Diâmetro médio aritmético [μm]
D_{32}	Diâmetro Médio de Sauter (SMD) [μm]

G	Energia Livre de Gibbs [J]
g	Subscrito que representa o gás circundante
H	Entalpia [J]
k	Energia cinética turbulenta [J]
K	Número de onda de ω
l	Subscrito que representa o líquido
L_s	Escala de comprimento [m]
m	Massa total injetada [kg]
\dot{m}	Vazão mássica [kg/s]
N	Número de gotas
p_{inj}	Pressão de injeção [bar]
R	Constante universal dos gases
r	Raio da gota [μm]
Re	Número de Reynolds
S	Entropia [J/K]
S	Penetração do <i>spray</i> [m]
T	Número de Taylor
U	Magnitude da velocidade do filme de líquido em relação a velocidade do gás circundante [m/s]
U_{inj}	Velocidade de injeção total [m/s]
V	Magnitude da velocidade da película, ou lâmina, de líquido [m/s]
W	Velocidade de em relação a velocidade do gás circundante [m/s]
We	Número de Weber
X	Distância percorrida do filme de líquido [m]
Z	Número de Ohnesorge

Sumário

1	INTRODUÇÃO	27
1.1	Objetivo geral	29
1.1.1	Objetivos específicos	29
1.2	Organização da dissertação	29
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	31
2.1	Fundamentos	31
2.1.1	Motores de Combustão Interna	31
2.1.1.1	Injeção Direta e Indireta	34
2.1.1.1.1	Tipos de injeção	35
2.1.2	Revisão Spray	37
2.1.2.1	Características do Spray	37
2.1.2.2	Injeção Direta	40
2.1.2.3	Atomização e <i>Break-Up</i>	42
2.1.3	Métodos Numéricos Aplicados a Mecânica dos Fluidos em Motores de Combustão Interna	46
2.1.3.1	Dinâmica dos Fluidos Computacional - CFD	46
2.1.3.1.1	As equações que governam o escoamento	46
2.1.3.1.2	Método de Volumes Finitos	50
2.1.3.1.3	Modelos de Turbulência	50
2.1.3.2	Propriedades dos Fluidos	54
2.1.3.3	Parâmetros numéricos	56
2.1.4	Modelagem do Spray	56
2.1.4.1	Modelos do <i>Break-Up</i>	57
2.1.4.2	Forças aerodinâmicas	67
2.1.4.3	Evaporação	68
2.1.4.4	Modelos de Colisão	69
2.1.5	O <i>software</i> OpenFOAM	70
2.1.6	Estado da Arte	72
3	METODOLOGIA	79
3.1	Simulação Numérica do <i>Spray</i> de Cone Oco	79
3.1.1	Modelagem do <i>Spray</i> utilizando o OpenFOAM	79
3.1.1.1	O começo da Injeção	79
3.1.1.2	O modelo LISA	80
3.1.1.3	O modelo de <i>break-up</i> secundário	80

3.1.2	Parâmetros Numéricos	81
3.1.3	Análise de <i>parcel</i> por segundo	83
3.1.4	Independência de malha	85
3.1.5	Análise do passo de tempo	86
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	91
4.1	Parte 1 - Resultados para as várias contra pressões	91
4.1.1	Câmara Atmosférica	91
4.1.1.1	Modelo com Rosin-Rammler a 1 bar	91
4.1.1.2	Modelo com LISA a 1 bar	93
4.1.2	Câmara com Contrapressão de 5 bar	93
4.1.2.1	Modelo Rosin-Rammler a 5 bar	94
4.1.2.2	Modelo LISA a 5 bar	95
4.2	Parte 2 - Comparação dos modelos	96
4.2.1	Modelo LISA com Diwakar	96
4.2.2	Modelo LISA com KHRT	98
4.2.3	Modelo LISA com TAB	101
4.2.4	Modelo Rosin Rammler com Diwakar	104
4.2.5	Modelo Rosin Rammler com KHRT	106
4.2.6	Modelo Rosin Rammler com TAB	107
4.3	Considerações Finais	108
5	CONCLUSÃO	111
5.1	Sugestão para trabalhos futuros	111
	REFERÊNCIAS	113
	ANEXOS	119
	ANEXO A – METODOLOGIA EXPERIMENTAL	121
A.1	Descrição do Experimento	121
A.1.1	Shadowgraphie	123
A.1.2	PDA	123

1 Introdução

O consumo global de energia está causando vários problemas ambientais e econômicos. O setor de transporte consome cerca de 55% dos recursos de petróleo mundiais e produz aproximadamente 25% dos gases que levam ao efeito estufa (Huang, 2014). No mercado dos Estados Unidos veículos leves, como carros de passeio, são responsáveis por uma grande fatia do consumo de combustíveis fósseis líquidos. Segundo (Huang, 2014), 60% de todo combustível que foi consumido, isso incluindo veículos pesados, aeronaves, navios, etc, no transporte nos Estados Unidos em 2012 foi para os veículos leves. Emissões de carros de passeio são nocivas para o meio ambiente e para a saúde. Dentre os componentes produzidos estão Monóxido de Carbono (CO), Hidrocarbonetos (HC), Óxidos de Nitrogênio (NO_x), e particulados (PM, abreviado do inglês - *Particulate Matter*). Levando esse cenário em conta, a União Europeia propôs uma série de medidas que regulam as emissões de veículos leves.

Outros países, como o Brasil e os Estados Unidos, também estão impondo regulamentações às emissões automotivas. No Brasil, o Programa de Controle de Poluição do ar por Veículos (PROCONVE) impôs desde 2014 que as emissões de CO , NO_x e PM não podem passar de $2,0[g/Km]$, $0,08[g/Km]$ e $0,025[g/Km]$, respectivamente (DieselNet, 2017).

Devido a essas novas restrições algumas fontes antecipam que o futuro de motores de combustão interna (abreviado do inglês, *Internal Combustion Engines* -ICE) está fadado ao fim. Segundo uma reportagem da revista *The Economist*, intitulada "Os dias dos motores de combustão interna estão contados" (Jan Berkeley, 2017), o ICE ainda irá sustentar a demanda de energia da indústria por algum tempo, mas o rápido desenvolvimento das tecnologias de bateria podem favorecer a sua substituição pelo motor elétrico.

Por outro lado, várias outras reportagens e artigos ((Timmers; Achten, 2016),(Gong et al., 2016),(Stuhldreher et al., 2015), (Paul A. Eisenstein, 2017)) mostraram que ainda existe muito espaço para o desenvolvimento de novas tecnologias para o ICE que garantiriam sua utilização por muito tempo e entre as tecnologias desenvolvidas estão:

- Injeção Direta, para substituir métodos antigos de injeção do combustível, melhorando dramaticamente a eficiência do motor.
- *Start/Stop*, um sistema que desliga o motor brevemente quando o motor está em algumas condições específicas, como *idle*, parado no sinal de trânsito, e em seguida ligando o motor quando o motorista pisa na embreagem.

- Nova transmissão de 8, 9, 10 velocidades, para otimizar os pontos de operação do motor, reduzindo com isso as perdas de energia.
- A tendência de *Downsizing* com o Turbo e/ou *Superchargers* permitindo que motores menores operem com potência e torque semelhantes a motores maiores, sendo mais eficientes.

Um exemplo da aplicação dessas tecnologias é o novo motor da Mazda, o Skyactive-X (Alex Kierstein, 2017), no qual se incluem diversas tecnologias, destacando a Ignição por Compressão com Carga Homogênea (do inglês *Homogeneous Charge Compression Ignition*, HCCI). Nesse motor a ignição ocorre em algumas cargas, através da compressão, no momento da injeção do combustível diretamente na câmara de combustão. Esse tipo de combustão está sendo desenvolvido com o objetivo de melhorar a economia de combustível e simultaneamente manter o desempenho, superando desvantagens associadas às perdas por bombeamento (chamadas de *throttling*) em cargas parciais.

Para se controlar de forma correta a combustão, especialmente nos casos de ignição por compressão ou para estratificação da mistura, é de extrema importância o controle da mistura de ar e combustível. A formação dessa mistura de ar e combustível, a evolução do *spray* e a sua atomização, combinado com a difusão e evaporação desse combustível no ar, juntamente com os movimentos do ar na câmara de combustão são muito importantes para controlar e otimizar a combustão (Allocca et al., 2002). Devido ao fato do acesso ótico à câmara de combustão ser de difícil acesso ou proibitivo, devido aos custos, a técnica mais coerente para se analisar os efeitos do *spray* na mistura de ar na câmara de combustão é a simulação computacional.

Modelos multidimensionais para o cálculo da dinâmica do *spray* estão sendo desenvolvidos há décadas. Dentre esses modelos, a abordagem Lagrangiana demonstrou ser a mais eficiente computacionalmente, conseguindo representar numericamente um *spray* de etanol. Esse método é utilizado para resolver as equações que governam os fenômenos que ocorrem na fase gasosa e as interações entre os gases e as gotas do fluido injetado. Para se calcular a dinâmica dos *Spray*, grupos discretos de gotas são introduzidos estocasticamente no domínio numérico na forma de um grupo chamado de *parcels*, e cada *parcel* representa um grupo de gotas com tamanho, velocidade e temperaturas idênticas.

No cálculo numérico é necessário um modelo para descrever a distribuição de gotas no momento de atomização do jato de líquido e também são necessários modelos para calcular os *break-up* subsequentes que formam gotas cada vez menores. Um avanço considerável foi feito na modelagem da atomização de jatos de *spray* por (Han et al., 1997) que estabeleceram uma metodologia para modelar o processo de atomização em que uma gota é injetada com um tamanho característico igual ao diâmetro do bico injetor e então a

quebra dessa gota em pequenas gotas é calculada por um modelo de estabilidade de jatos líquidos.

Em seu trabalho, (Babinsky; Sojka, 2002) estudaram o método empírico de distribuição de tamanho de gotas que produziu um método de ajuste de curva dos dados coletados para vários injetores e condições de injeção. Um padrão de curva foi observado e ele se tornou a base para a distribuição empírica. A deficiência dessa abordagem é a dificuldade em extrapolar essa informação para outros pontos de operação, fora dos pontos medidos experimentalmente. Sem dados experimentais adicionais não é possível, seguindo essa abordagem, ter certeza se os dados novos estão representando o *spray* e na maioria dos casos esses novos testes experimentais são impossíveis, não práticos ou muito caros. Nesse trabalho além desse método de distribuição de gotas, também foi aplicada a teoria desenvolvida por (Senecal et al., 1999), na qual a distribuição inicial é calculada com base na estabilidade de um filme de líquido de espessura baseada nas características do injetor, na pressão de injeção e nas características do fluido injetado.

1.1 Objetivo geral

O objetivo geral desta dissertação é desenvolver e validar uma metodologia numérica para modelar e analisar o *spray* de etanol gerado por um injetor automotivo do tipo *Pressure-Swirl* em uma câmara com contrapressão utilizando o *software* de código aberto OpenFOAM.

1.1.1 Objetivos específicos

- Estudo e domínio do software open source OpenFOAM para aplicações específicas do estudo de *spray* de injeção;
- Testes dos diferentes modelos que caracterizam o *spray* da injeção direta;
- Caracterização do *spray* de etanol para várias condições de injeção direta;
- Calibração de um modelo de *spray* utilizando dados experimentais.

1.2 Organização da dissertação

A dissertação está dividida em seis capítulos, descritos a seguir.

No Capítulo 1 é apresentada a introdução, contextualizando o leitor sobre o assunto, descrevendo os principais estudos recentes sobre ICE e o *spray*, que evidenciam a sua relevância e motivaram o presente trabalho. Em seguida, são enumerados os objetivos do trabalho.

No Capítulo 2 uma revisão dos fundamentos é realizada, com intuito de melhor desenvolver o assunto e suas implicações, assim como apresentar o conceito da tecnologia de atomização e os tipos de injetores utilizados na injeção direta. Ainda nesse capítulo são apresentadas propriedades que influenciam o processo de atomização.

O Capítulo 3, nomeado de Metodologia, tem por finalidade apresentar as ferramentas utilizadas, o procedimento numérico e as técnicas de medição utilizadas na aquisição dos dados posteriormente analisados.

No capítulo 4 são apresentados e discutidos os resultados das características macroscópicas e microscópicas do *spray* obtidas por meio de simulações numéricas.

No Capítulo 5 é apresentada a conclusão do trabalho, destacando os principais resultados e sugestões para trabalhos futuros.

2 Revisão Bibliográfica

Neste capítulo é realizada uma breve revisão da literatura, primeiramente apresentando alguns conceitos de motores de combustão interna e em seguida os detalhes principais da atomização e da injeção direta de combustível, descrevendo as características macroscópicas e microscópicas do spray, inclusive dos parâmetros que afetam essas características e por último são apresentados os fundamentos das técnicas ópticas de medição.

2.1 Fundamentos

2.1.1 Motores de Combustão Interna

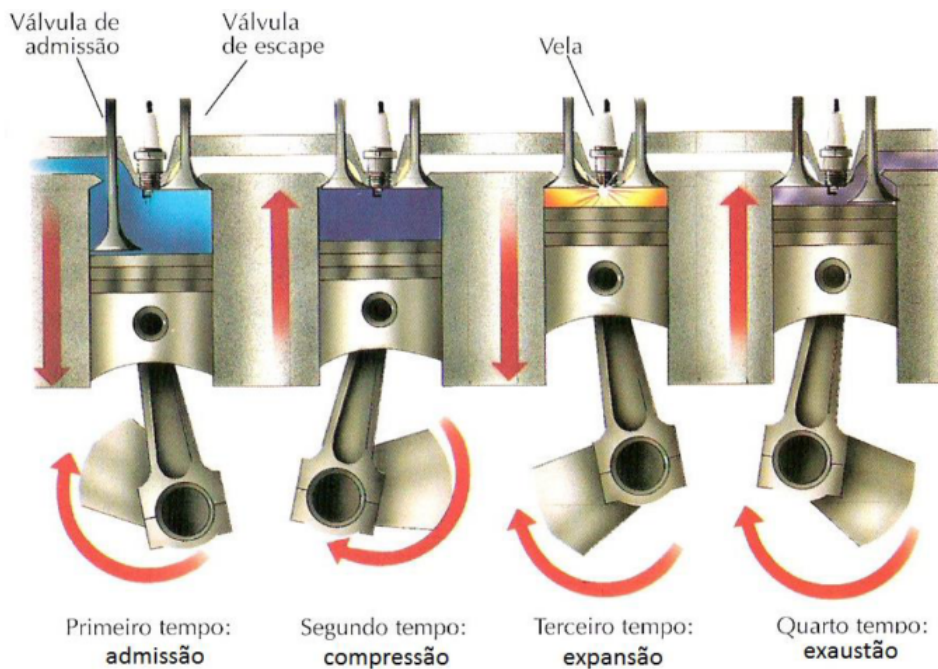
O motor de combustão interna trabalha com os princípios da termodinâmica e com os conceitos de compressão e expansão de fluidos gasosos para gerar trabalho e movimento rotativo. De acordo com (Heywood, 1988) o motor de combustão interna tem como objetivo transformar a energia química armazenada nos combustíveis em potência mecânica. O conceito do motor de combustão interna baseia-se no mecanismo de expansão de um gás dentro de uma câmara fechada. Um combustível é queimado dentro da câmara (volume de controle) com um pistão em uma das suas extremidades. Quando a energia química do combustível é liberada na forma de calor, o gás se expande gerando o movimento do pistão e realizando trabalho mecânico.

Criado e patenteado por Nikolaus August Otto, no ano de 1866, os motores de combustão interna de ignição por centelha funcionam com um ciclo de quatro tempos: admissão, compressão, expansão e exaustão. A Figura 1 ilustra os tempos de um motor de combustão interna de ciclo Otto, com ignição por centelha. Existem também motores de dois tempos e motores Diesel, esses últimos com base na ignição por compressão, mas estes não são o foco do presente trabalho e não serão aqui apresentados.

Na admissão, a válvula abre, permitindo a entrada do ar, proveniente do coletor e anteriormente do ambiente externo, pelo pórtilo de admissão para o interior do cilindro. Cada tempo do motor corresponde a 180° de giro do virabrequim, componente do eixo de rotação do motor, que tem como objetivo transformar o movimento retilíneo do pistão em de rotação. Assim, os pistões giram o virabrequim por meio das bielas, o que proporciona o giro do eixo do motor.

Chama-se de Ponto Morto Superior (PMS) ao ponto mais alto do pistão (começo da admissão, final da compressão, início da expansão e final da exaustão). Similarmente, quando o pistão está no ponto mais baixo do cilindro (final da admissão, início da

Figura 1 – Ciclo do Motor Otto



Fonte: (Amorim, 2016)

compressão, final da expansão e início da exaustão), a posição é chamada de Ponto Morto Inferior (PMI).

Após o tempo de admissão, as válvulas se fecham e tem início a compressão, onde o ar é comprimido dentro da câmara de combustão até que o pistão alcance o PMS. No ciclo Otto ideal, no momento em que o pistão atinge o PMS após a admissão da mistura ocorre a ignição da mistura de ar e combustível. A ignição é iniciada por uma centelha proveniente da vela de ignição. O eletrodo da vela produz a centelha que inicia o processo de combustão. Entre o momento de admissão e a compressão tem-se a introdução do combustível através da injeção dentro da câmara de combustão, por uma injeção direta, ou no pórtilo de admissão, por uma injeção indireta.

A ignição da mistura ar/combustível é iniciada por uma centelha, a qual começa o processo de queima por meio de uma frente de chama laminar no *kernel* inicial que rapidamente se transforma em uma frente de chama turbulenta, (Norbert, 2000). Esse *kernel* se forma em uma chama turbulenta que se desenvolve, praticamente em uma forma esférica, até atingir as paredes da câmara de combustão. Durante a combustão essa frente de chama aumenta, tanto em volume quanto em área, gerando uma quantidade crescente de carga em combustão. Segundo (Daeyup et al., 1999), normalmente o *kernel* inicial da chama se direciona para longe da vela de ignição devido ao *swirl* quando a vela não é localizada no centro do cilindro. Segundo (Heywood, 1988), mesmo após a chama atingir as paredes do cilindro a combustão continua, pois cerca de 25% de massa de mistura de ar combustível ainda está disponível para queima. Esse fenômeno ocorre no curso de

expansão, onde os gases são queimados e posteriormente liberados para a atmosfera no curso de exaustão e onde as válvulas de exaustão se abrem e o motor está pronto para recomeçar o ciclo.

Outro fator crucial que caracteriza a combustão e depende da formação de mistura é chamado de fator Phi (ϕ), (Heywood, 1988). A literatura mais atual, assim como o presente trabalho, utiliza com mais frequência o fator lambda (λ), que é o inverso do fator Phi. O fator lambda é a razão de equivalência ar-combustível, que corresponde ao quociente entre a razão ar-combustível (AFR) real e a razão ar-combustível estequiométrica (teórica). A razão ar-combustível é definida pelo quociente da massa de ar pela massa de combustível. As Equações (2.1) e (2.2) definem razão ar-combustível e lambda, respectivamente, onde m representa a massa.

$$AFR = \frac{m_{ar}}{m_{combustível}} \quad (2.1)$$

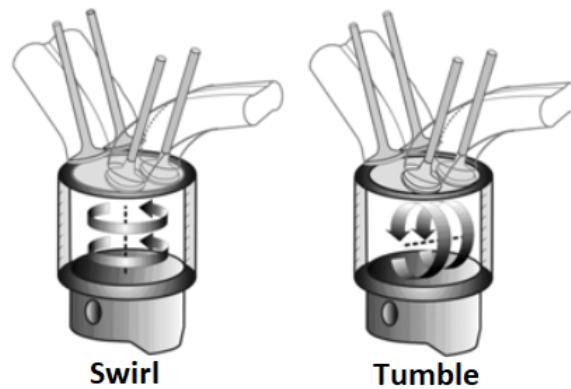
$$\lambda = \frac{AFR_{real}}{AFR_{estequiométrica}} \quad (2.2)$$

Existem várias geometrias de câmaras de combustão, que variam em relação à posição das válvulas de admissão e escape, à vela de ignição, ao número de válvulas por cilindro, e até mesmo ao número de velas por cilindro, além da própria forma do interior da câmara de combustão, (Amorim, 2016). A geometria da câmara de combustão, assim como a dos pórticos, também tem influência significativa nos movimentos característicos do escoamento dentro dos cilindros de motores de combustão interna. Esses movimentos distribuem a energia cinética turbulenta do escoamento e são essenciais para a combustão adequada.

Muitos estudos vêm sendo realizados buscando uma melhor compreensão do escoamento no interior de uma câmara de combustão, uma vez que ele está diretamente relacionado com o rendimento do motor, além das emissões de gases. Tratando-se de um caso específico, o escoamento de ar na câmara antes do processo de combustão é avaliado por parâmetros conhecidos como *swirl*, *tumble* e *cross-tumble* e seus coeficientes. Segundo (Júnior, 2017), o escoamento de ar na câmara de combustão possui uma natureza rotacional, avaliada por esses coeficientes que diferem apenas no plano onde são avaliados. Os movimentos de *tumble* e *swirl* no interior do cilindro podem ser observados na Figura 2.

A forma como o escoamento se comporta dentro do cilindro representa um importante papel na mistura do ar com o combustível. Por exemplo, a evolução da turbulência durante o tempo de compressão melhora a mistura do ar com o combustível. O *swirl* é uma importante estrutura de escoamento dentro do cilindro para assegurar uma propagação de chama estável, e também ajudar a manter a estratificação (Hindi; Pimenta, 2011).

Figura 2 – Estruturas do escoamento de ar dentro do cilindro



Fonte: adaptado de (Basshuysen, 2007)

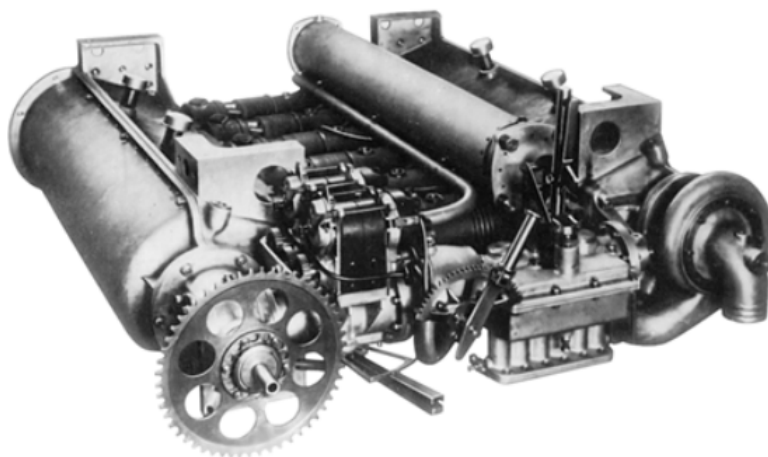
Os movimentos de *swirl*, *tumble* e *cross-tumble* podem ser desenvolvidos a partir dos pórticos da admissão e também estão relacionados com a posição das válvulas e com a distribuição da entrada de ar no interior do cilindro (Amorim, 2016).

2.1.1.1 Injeção Direta e Indireta

Em 1914 Junkers inventou o primeiro motor de injeção direta (Basshuysen, 2007). O objetivo do motor de Junkers é de juntar as características do motor do ciclo Diesel com os de ciclo Otto. Esse motor está representado na Figura 3.

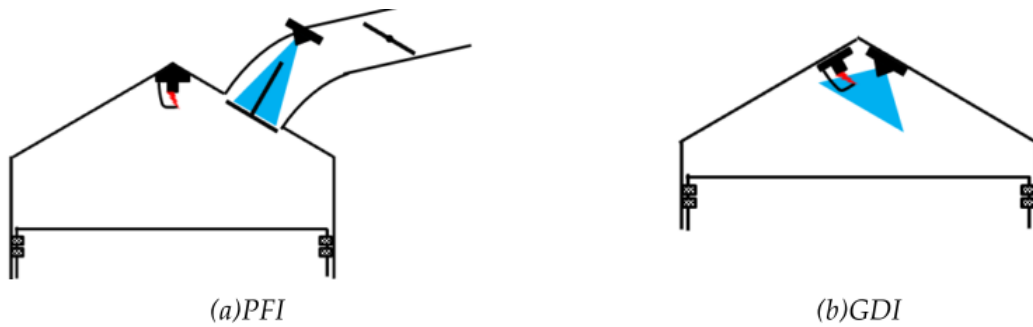
A injeção indireta de combustível, PFI (*Port Fuel Injection*) está representada na Figura 4 (a). Já para os motores de injeção direta, DI (*Direct Injection*), representado na Figura 4 (b), ocorrem diversas diferenças, entre as quais as pressões de injeção de

Figura 3 – Motor Junkers de 1914



Fonte: (Basshuysen, 2007)

Figura 4 – Comparação esquemática de um motor PFI com um motor DI



Fonte: (Huang, 2014)

combustível. Sistemas PFI comumente operam com pressões de 3 a 6 bar enquanto sistemas DI utilizam pressões da ordem de 100 bar.

Para uma melhor descrição, na Figura 5 é apresentada uma seção em corte de dois motores, o da esquerda utilizando a tecnologia PFI e o da direita utilizando DI. Uma das limitações da injeção indireta é devida ao local de injeção, pois entre a câmara de combustão e o injetor se encontra a válvula de admissão. Em consequência à esse posicionamento do injetor parte do combustível injetado irá se depositar na válvula de admissão, levando ao aumento de emissões e do consumo de combustível. Outro ponto importante a se ressaltar é que para os motores com PFI a injeção de combustível somente pode ocorrer no momento de admissão, quando a válvula de admissão está aberta. Por outro lado, nos motores com DI é possível a injeção de combustível em diversos momentos.

Segundo (Fraidl; Piock; Wirth, 1996) o potencial teórico da injeção direta é claramente evidenciado com melhorias de cerca de 20% em cargas parciais do motor e de até 35% em baixas rotações, próximas do *idle*. Na Tabela 1 são relacionadas as vantagens do uso da injeção direta ao invés da indireta segundo (Lefebvre, 1989).

2.1.1.1.1 Tipos de injeção

Um dos desafios associados ao desenvolvimento de motores com a tecnologia DI é a dificuldade de se manter uma combustão estável, pois para isso é necessária uma mistura de ar combustível apropriada. Essa mistura de ar combustível é influenciada pela atomização do combustível, a quebra das gotas, a evaporação e a eficiência da mistura. Vários projetos de câmaras de combustão foram propostos para motores, alterando a posição relativa do injetor e da vela de ignição, assim como da estrutura do fluxo de ar-combustível dentro do cilindro. Três tipos diferentes de sistemas de combustão estão mostrados na Figura 6.

O projeto chamado de *Wall Guided*, mostrado na Figura 6 A, foi muito utilizado na primeira geração de motores DI, com uma injeção lateral de alta pressão, guiada através do *bowl* do pistão, e com a ajuda de um *tumble* forte formado pelo fluxo do ar proveniente da

Figura 5 – Sistemas de injeção de combustível: (Esquerda) PFI (Direita) DI



Fonte: (Júnior, 2017)

Tabela 1 – Diferença entre a injeção indireta e direta

Parâmetros	Vantagens
Economia de Combustível	<ul style="list-style-type: none"> • Substantial redução de perdas de bombeamento • Menor perda de calor • Maior razão de compressão possível
Dirigibilidade	<ul style="list-style-type: none"> • Melhor resposta transiente • Melhor início de funcionamento a frio
Controlabilidade da Razão Ar/Combustível	<ul style="list-style-type: none"> • Maior rapidez no início e estabilização da combustão • Menor necessidade de enriquecimento durante o início do funcionamento
Emissões	<ul style="list-style-type: none"> • Podem reduzir emissões de hidrocarbonetos • Redução de emissão de CO_2

Fonte: adaptado de (Lefebvre, 1989)

admissão. Motores com essa tecnologia normalmente produzem uma quantidade elevada de emissão de hidrocarbonetos, HC, devido à deposição de combustível nas paredes do cilindro e no topo do pistão. Além disso, para uma mistura estequiométrica de ar e combustível é necessária uma calibração refinada do momento de injeção com o movimento do pistão, em conjunto com a velocidade de rotação do motor.

No projeto *Air Guided*, segundo da Figura 6 B, o contato do *spray* com as paredes da câmara de combustão é evitado. Idealmente, toda mistura de ar-combustível deve ser guiada pelas estruturas de fluxo, *swirl* e *tumble*, diretamente para a região próxima à vela de ignição, sem contato com as paredes do cilindro e com o topo do pistão. Nesse tipo de conceito de motor é importante manter uma estrutura de fluxo forte, com *swirl* ou *tumble*, até o momento da combustão, o que pode resultar em uma eficiência volumétrica reduzida

e conseqüentemente numa performance reduzida.

O projeto *Spray Guided*, terceiro da Figura 6 C, representa a segunda geração no desenvolvimento de motores de combustão interna modernos. Nesse tipo de motor um injetor de alta pressão é posicionado no centro da câmara de combustão e a vela de combustão está localizada precisamente na borda do *spray*. O posicionamento da vela de ignição bem próximo ao injetor tem o objetivo de garantir uma mistura ar-combustível específica entre os eletrodos da vela em diversos momentos do ciclo e rotações do motor. Esse tipo de design da câmara de combustão é um desafio para os engenheiros. Além disso, garantir a repetitividade do padrão do *spray* é essencial para reduzir a variabilidade cíclica da combustão. Por isso, é importante caracterizar de forma precisa o *spray*. Motores desenvolvidos com o design otimizado de *Spray Guided* podem atingir uma boa economia de combustível, com redução do consumo de combustível de cerca de 4-6% com relação aos motores com o projeto *Wall Guided* ((Huang, 2014) *apud* Wirth *et al.*).

A relação entre o combustível injetado e o escoamento de ar é extremamente importante, sobretudo nos processos de combustão que trabalham com estratificação de carga. Para obter a estratificação desejada o combustível é injetado no cilindro de tal modo que o mesmo evapora numa determinada área; assim o escoamento de ar transporta a nuvem de mistura em direção à vela de ignição a alcançando no momento da ignição.

2.1.2 Revisão Spray

2.1.2.1 Características do Spray

O primeiro passo para entender os processos e características do *spray* é entender quais características que o definem. A penetração (S), como ilustrado na Figura 7, define a distância máxima percorrida pelo *spray* a cada momento, limitada pela distância entre

Figura 6 – Posicionamento do injetor na câmara de combustão

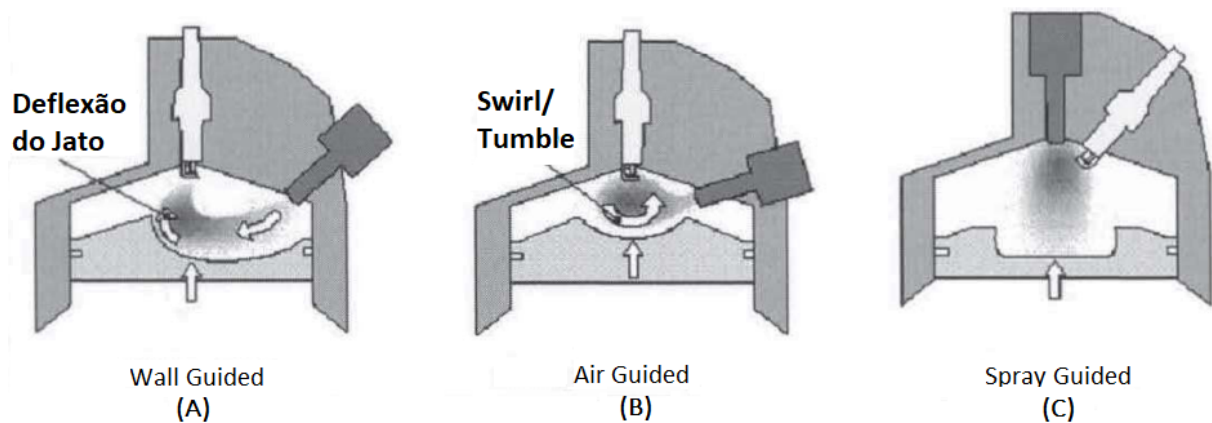
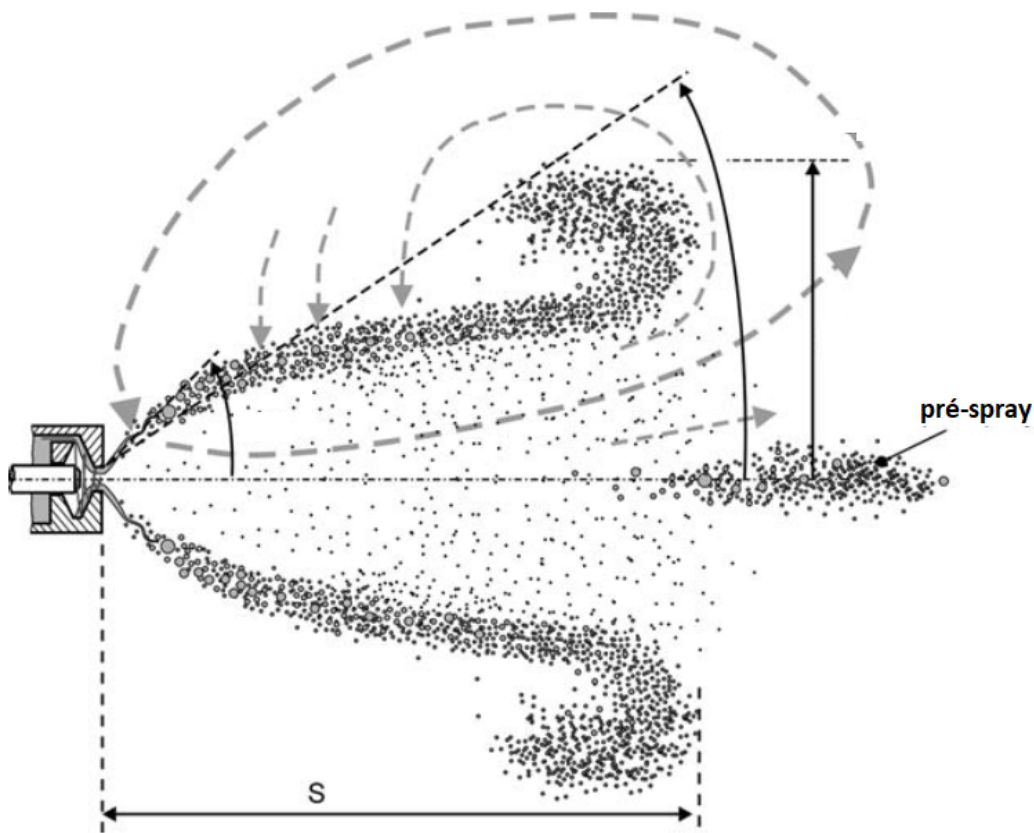


Figura 7 – Atomização típica de um injetor do tipo *Pressure-Swirl*

Fonte: adaptado de (Baumgarten, 2006)

o bico injetor e o pistão. O *Pressure Swirl Spray* ou *Pre-Spray*, que é formado no início da injeção devido à falta da rotação característica (*swirl*) e da baixa velocidade de injeção inicial não é contabilizado para o cálculo da penetração. A definição experimental da penetração é baseada na identificação da posição das gotas do *spray* através da intensidade da luz. Dessa forma, como são utilizando técnicas indiretas para a medição, que posteriormente serão mencionadas, a penetração não pode ser diretamente convertida em um valor absoluto e exato da penetração do líquido. Valores de 95%, 97% e 99% da fração mássica são geralmente os fatores utilizados para calcular o ponto mais distante do bico injetor, e essa distância é utilizada como a medida da penetração.

Outra característica do *spray* é o diâmetro que quantifica o tamanho das gotas. Durante a atomização são formadas gotas de diversos diâmetros. Para poder relacionar os diâmetros das gotas com uma métrica, estabeleceu-se uma média de diâmetros representativos de um grupo amostral. Assim, (Júnior, 2017 apud Mugele; Evans, 1951), propuseram uma relação geral para determinar o diâmetro médio das gotas de *spray* formados por injetores, definida pela Equação (2.3), na qual D é o diâmetro representativo, a e b são os índices que dependem do tipo de média empregada e N é o número das gotas com diâmetro

d. Na Tabela 2 são apresentados os diferentes diâmetros médios que são utilizados na literatura.

$$D_{ab} = \frac{\sum_{N=1}^n N_i (d_i)^a}{\sum_{N=1}^n N_i (d_i)^b} \quad (2.3)$$

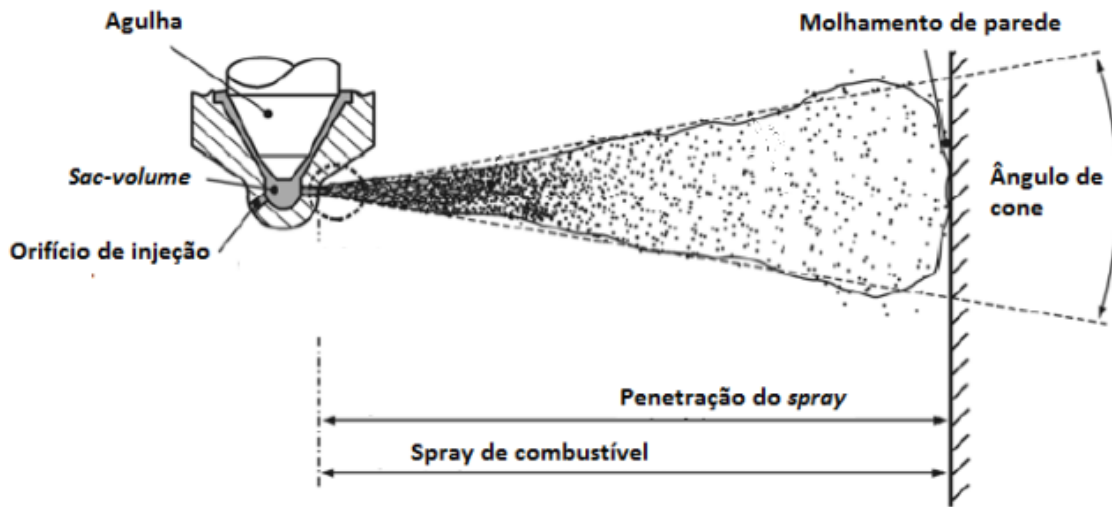
Tabela 2 – Diâmetros médios das gotas e suas aplicações

a	b	Ordem (a+b)	Símbolo	Diâmetro médio	Expressão	Aplicação
1	0	1	D_{10}	Aritmético	$\frac{\sum N_i (d_i)}{\sum N_i}$	Comparações
2	0	2	D_{20}	Superficial	$\left(\frac{\sum N_i (d_i)^2}{\sum N_i (d_i)} \right)^{1/2}$	Controle de área Superficial
3	0	3	D_{30}	Volumétrico	$\left(\frac{\sum N_i (d_i)^3}{\sum N_i (d_i)} \right)^{1/3}$	Controle de volume
2	1	3	D_{21}	Superfície aritmético	$\frac{\sum N_i (d_i)^2}{\sum N_i (d_i)}$	Absorção
3	1	4	D_{31}	Volume aritmético	$\left(\frac{\sum N_i (d_i)^3}{\sum N_i (d_i)} \right)^{1/2}$	Evaporação, difusão molecular
3	2	5	D_{32}	Sauter (SMD)	$\frac{\sum N_i (d_i)^3}{\sum N_i (d_i)^2}$	Transferência de massa, reações
4	3	7	D_{43}	De Brouckere ou Herdan	$\frac{\sum N_i (d_i)^4}{\sum N_i (d_i)^3}$	Combustão, Equilíbrio

Fonte: adaptado de (Lefebvre, 1989)

Um dos diâmetros médios mais utilizados é o de Sauter, SMD, (*Sauter Mean Diameter*), que representa o diâmetro de uma gota na qual a razão do volume pela área superficial é representativo para a totalidade do *spray* para um tempo específico (Lefebvre, 1989).

Outro parâmetro muito importante para a análise do *spray* é o ângulo formado pelo seu cone (α), apresentado na Figura 8, que é influenciado principalmente pelas dimensões do injetor, pelas propriedades do líquido e pela massa específica do meio no qual o *spray* é descarregado (Lefebvre, 1989). Sem a definição do instante específico do desenvolvimento do *spray* e pontos do espaço específicos para a medição, é impossível determinar o valor representativo para o ângulo do cone de *spray* ((Guzzo, 2012) *apud* ZHAO *et al.* (2002)).

Figura 8 – Características de um *spray*

Fonte: adaptado de (Baumgarten, 2006)

A dispersão de uma atomização pode ser expressa quantitativamente se em determinado instante o volume de líquido dentro do cone de *spray* for conhecido. O grau de dispersão poderá então ser expresso como a razão do volume geométrico do *spray*, determinado a partir da dimensão máxima observada, pelo volume de líquido contido no mesmo (Guzzo, 2012).

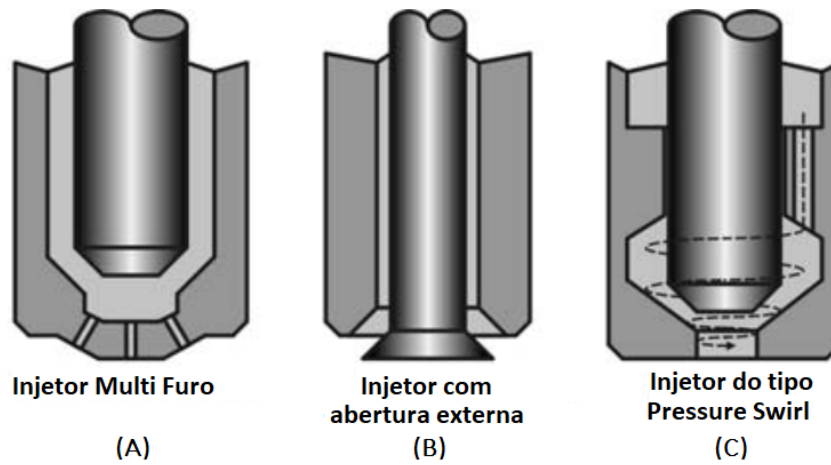
2.1.2.2 Injeção Direta

O motor com injeção direta e de combustão por centelha, DISI, (*Direct Injection Spark Ignition*) representa um avanço significativo em relação ao motor PFI, especialmente em relação ao consumo de combustível e com redução de emissão de CO_2 , (Baumgarten, 2006).

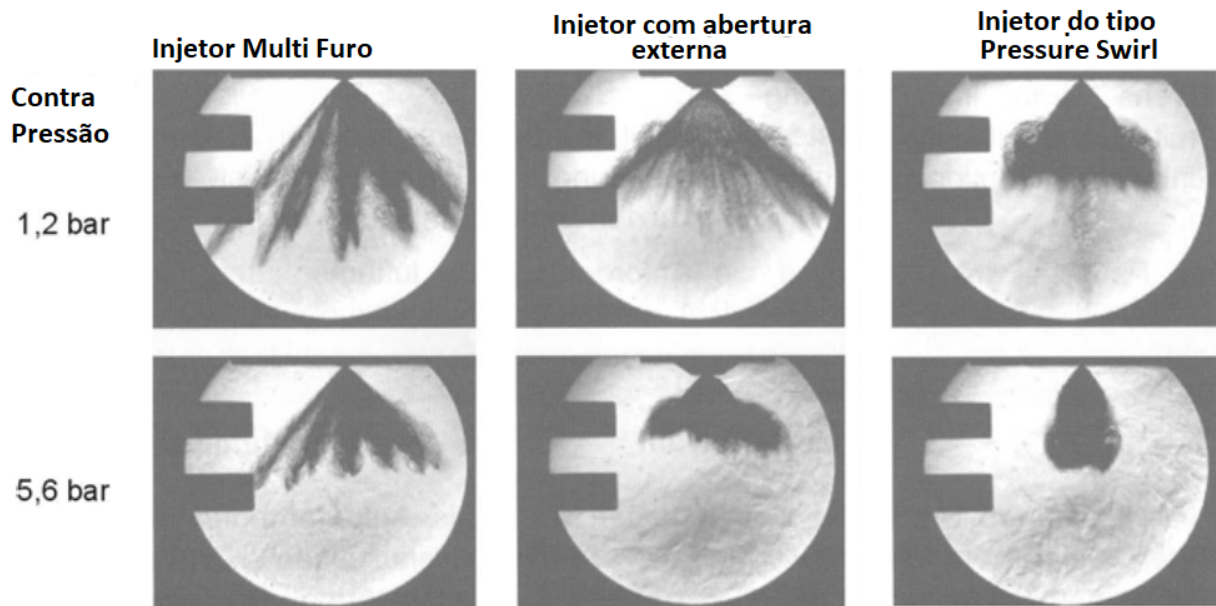
A formação da mistura ar-combustível é extremamente importante para o processo de combustão e em especial para motores DI. Com a finalidade de proporcionar a mistura ar-combustível mais adequada, diferentes tipos de injetores foram desenvolvidos para injetar de diversas formas o combustível dentro da câmara de combustão. Na Figura 9 pode-se ver três desses tipos de bico injetor e o formato do *spray* na câmara de combustão. A direção, estrutura e a forma de cada *spray* individual são bem conhecidos na literatura devido à injeção de alta pressão dos motores à diesel.

O primeiro tipo de injetor da Figura 9 A é o multifuro. Esse tipo de injetor produz *sprays* com uma penetração elevada e gotas de diâmetros maiores. Portanto, como observado na Figura 10, o *spray* é altamente não homogêneo, com regiões ricas em combustível

Figura 9 – Tipos do Bico Injetor do Eletroinjeter



Fonte: adaptado de (Basshuysen, 2004)

Figura 10 – Tipos de *Spray*

Fonte: adaptado de (Basshuysen, 2004)

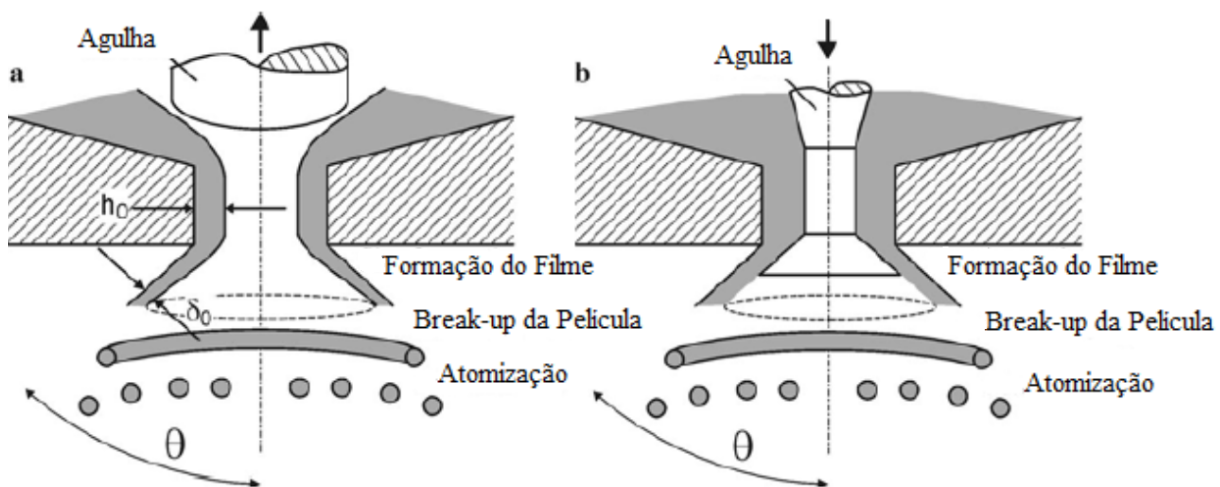
separadas por zonas pobres em combustível. Consequentemente, a combustão dessa mistura não homogênea pode resultar em velocidades de queima diferentes e aumentar as emissões de particulados e de NO_x . A vantagem de se utilizar o injetor multifuro está na estrutura do *spray*, que se mantém praticamente inalterada, com exceção da penetração, com o aumento da contrapressão da câmara de combustão, sendo esse um fator muito importante no projeto de câmaras de combustão do tipo *Spray Guided*.

As outras duas categorias de *spray* apresentadas na Figura 9, a do injetor com abertura externa e a do tipo com abertura interna, podem ser considerados como *Pressure*

Swirl e produzem um cone de *spray* oco, chamado de *Hollow Cone Spray*. Na Figura 10 é apresentado o formato típico desse tipo de *spray*. A vantagem desse tipo de injetor é a adequada razão de área para volume que produz uma maior atomização sem uma penetração elevada. O tamanho médio das gotas é normalmente menor do que nos injetores do tipo multifuro. Detalhes desse tipo de estrutura são discutidos a seguir, na presente dissertação, pois o injetor utilizado nos testes analisados é do tipo *Pressure Swirl*.

Em um injetor do tipo *Pressure Swirl*, o combustível entra tangencialmente na câmara anterior à saída do injetor, para a câmara de *swirl*. Ao sair do injetor, o movimento rotacional do combustível forma um núcleo de ar. Em consequência da redução da área da câmara de *swirl* na saída do injetor a velocidade do combustível aumenta. Esse líquido passa pelo bocal em forma de cone do injetor e entra como uma película de líquido para a câmara de combustão, como apresentado na Figura 11, onde, devido a uma série de fenômenos, dentre eles a conservação da massa, essa película se desintegra em pequenas gotas.

Figura 11 – Atomização para (a) injetor *pressure-swirl* de abertura interna (b) injetor *pressure-swirl* de abertura externa



Fonte: adaptado de (Baumgarten, 2006)

O injetor do tipo *Pressure Swirl* de abertura externa, Figura 11, não fecha completamente com uma contrapressão e normalmente não apresenta o *pre-spray*. Essa pode ser uma vantagem para a formação de mistura em um motor DISI (Huang, 2014). Neste trabalho é estudado o injetor da primeira geração de DISI, o *Pressure Swirl* de abertura interna.

2.1.2.3 Atomização e *Break-Up*

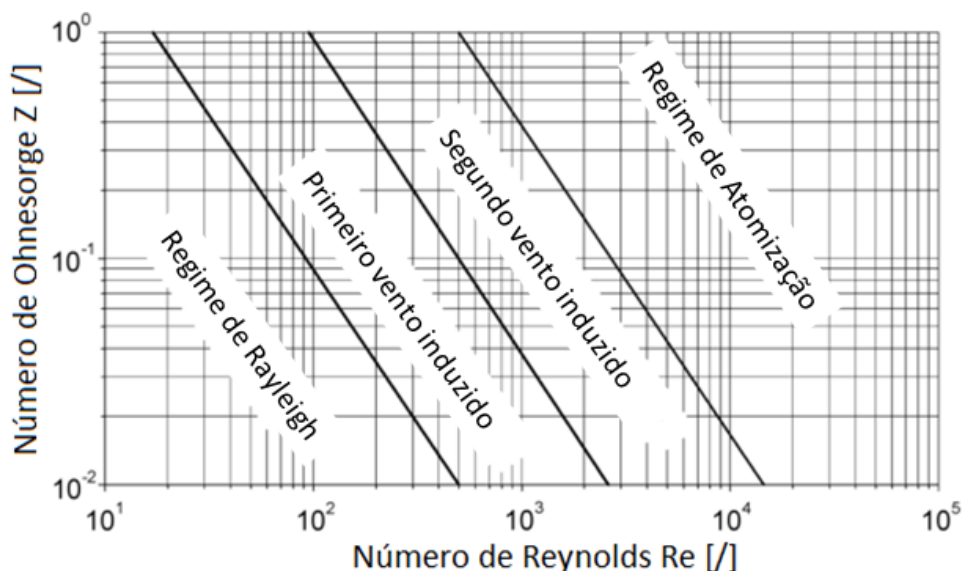
Apesar dos motores de combustão interna já terem alcançado um alto patamar de sofisticação, ainda são necessárias melhorias na formação da mistura e na combustão com o

objetivo de diminuir as emissões e melhorar a performance do motor. A forma e as demais características do *spray* são de extrema importância para a formação da mistura, portanto, é de grande relevância o estudo do *spray* proveniente do injetor. Para isso, primeiramente é importante entender o processo de atomização dos fluidos, que consiste na superação da tensão superficial causando a dispersão do filme líquido na forma de pequenas gotículas. Essa quebra da tensão superficial é chamada de *break-up* e pode ocorrer em diversos momentos de um escoamento bifásico, onde há, por exemplo, substância em estado líquido em contato com o ar.

O *break-up* depende da velocidade relativa (líquido/gás) e das propriedades do líquido e do gás do entorno. Existem diversos mecanismos de *break-up* e, para o caso de injetores, eles são normalmente caracterizados pela distância entre o injetor e a primeira gota formada (distância chamada de comprimento de *break-up*) e o diâmetro das gotas produzidas, (Baumgarten, 2006).

Ohnesorge propôs uma descrição quantitativa dos processos de *break-up* do jato do *spray*. Para isso vários testes foram realizados com medições do comprimento do jato intacto, mostrando que o processo de desintegração pode ser representado por um índice, o número de Ohnesorge (Z), que depende do número de Weber (We) do líquido, e pelo cálculo do número de Reynolds (Re) (Baumgarten, 2006 apud Ohnesorge, 1931). A Figura 12 mostra o Diagrama de Ohnesorge, que representa o número de Ohnesorge em função do número de Reynolds calculado para o líquido, para os quatro regimes de *break-up* primário.

Figura 12 – Diagrama de Ohnesorge: regimes de *break-up*



Fonte: adaptado de (Baumgarten, 2006)

O cálculo do número de Reynolds é feito utilizando a Equação (2.4), na qual μ_l é a viscosidade dinâmica do fluido, D_0 é o diâmetro do orifício do bico injetor, u é a velocidade

do jato, ρ é a massa específica do fluido e l é um subscrito que representa o líquido de trabalho.

$$Re = \frac{uD_0\rho_l}{\mu_l} \quad (2.4)$$

O número de Weber para o líquido é definido pela Equação 2.5, onde σ é a tensão superficial do líquido e os demais parâmetros foram definidos anteriormente.

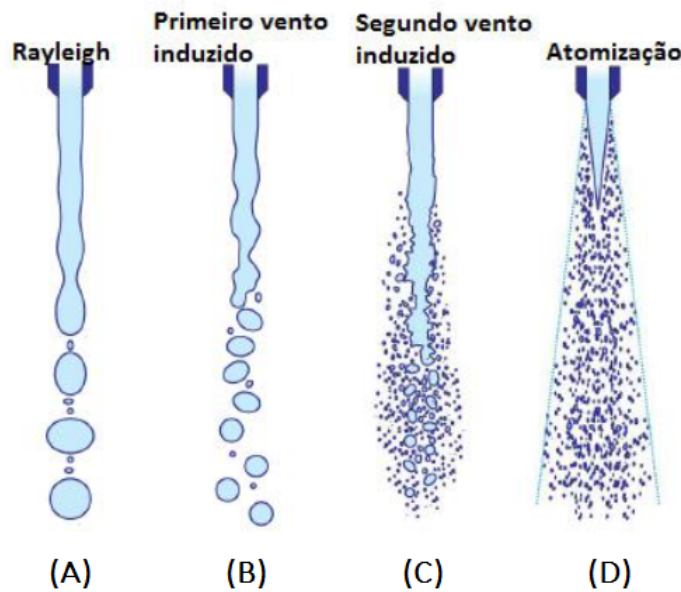
$$We_l = \frac{u^2 D_0 \rho_l}{\sigma} \quad (2.5)$$

O número de Ohnesorge é então determinado pela Equação (2.6).

$$Z = \frac{\sqrt{We_l}}{Re} = \frac{\mu_l}{\sqrt{\sigma\rho D_0}} \quad (2.6)$$

Observa-se na Equação 2.6 que quanto maior a velocidade do jato (μ_l), maior número de Ohnesorge. Para um valor fixo de densidade e tensão superficial, diâmetros do orifício do bico injetor pequenos também fazem com que o número de Ohnesorge cresça atingindo assim o regime de atomização, como observado na Figura 12. Por outro lado, para velocidades baixas, nenhum jato é formado, ocorrendo apenas o gotejamento, mas com o aumento da velocidade o jato se forma. Na Figura 13 são representados os quatro diferentes regimes em um jato do *spray*.

Figura 13 – Representação dos regimes de *break-up* do jato do *spray*



Fonte: adaptado de (Baumgarten, 2006)

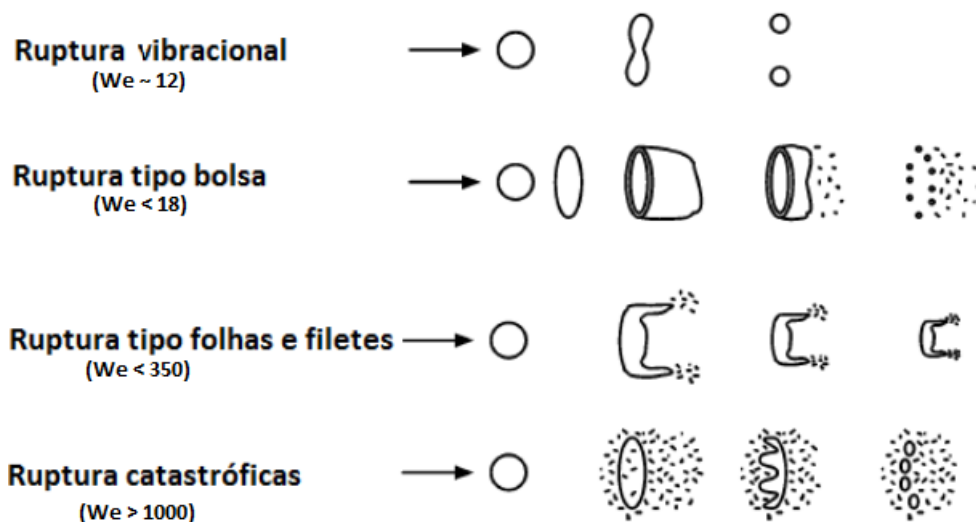
(Heywood, 1988) e (Senecal et al., 1999) demonstram que existe uma dependência da dispersão das gotas com o crescimento das ondas na superfície da lâmina do líquido, que

também depende do efeito da tensão superficial, das forças aerodinâmicas e da viscosidade do fluido.

No caso de *sprays* produzidos por injetores, o *break-up* é causado pelas interações aerodinâmicas entre o líquido e o gás (atrito e pressão), induzidas pela velocidade relativa. Primeiramente, a ação das forças aerodinâmicas na lâmina do líquido que sai do bico injetor resulta num crescimento instável de ondas na interface líquido/gás. O aumento da instabilidade dessas ondas leva à separação do líquido e, conseqüentemente, à formação de pequenas gotas, fenômeno chamado de *break-up* primário, ou primeira quebra. Após a primeira quebra, as gotas continuam susceptíveis a forças aerodinâmicas, enquanto a tensão superficial das gotas tenta mantê-las em formato esférico, reagindo contra essas forças. Como a tensão superficial cresce com a curvatura da superfície da gota, quanto menor a gota, maior a tensão superficial e maior a velocidade relativa líquido-gás, o que causa novamente instabilidade fazendo com que a gota se quebre em gotículas cada vez menores. Esse fenômeno de redução dos diâmetros das gotas, que ocorre após a atomização do jato, é chamado de segunda quebra ou *break-up* secundário, (Amorim, 2016).

Experimentalmente foi demonstrado que, dependendo do número de Weber (We), podem ocorrer várias formas de *break-up*, representados na Figura 14.

Figura 14 – Formas de *break-up*



Fonte: adaptado de (Baumgarten, 2006)

Observa-se na Figura 14 que quanto menor o número de Weber, ou seja, sendo os esforços no líquido inferiores em relação a tensão superficial, maior o tamanho das gotículas que se quebram do conjunto inicial.

2.1.3 Métodos Numéricos Aplicados a Mecânica dos Fluidos em Motores de Combustão Interna

2.1.3.1 Dinâmica dos Fluidos Computacional - CFD

(Versteeg; Malalaskera, 2007) definem a Dinâmica dos Fluidos Computacional (*Computational Fluid Dynamics*) como a análise de sistemas envolvendo escoamento de fluido e transferência de calor associada a fenômenos como reações químicas, por meio de simulações através de cálculos numéricos utilizando o computador.

As ferramentas de modelagem CFD de alta fidelidade, associadas à química do combustível, permitem que os projetistas de motores obtenham resultados de simulação confiáveis. Métodos de otimização eficientes e *softwares* de CFD atuais reduzem significativamente o tempo de computação dos ciclos de otimização, o que torna a abordagem de otimização computacional mais competitiva do que as experiências em laboratório, quando comparados seus resultados com os testes experimentais. No livro de (Shi; Hai-Wen; Reitz, 2014), é apresentada uma revisão da literatura sobre essa técnica, concluindo que a otimização computacional de motores de combustão interna está se tornando uma parte indispensável de projetos de motores práticos, fornecendo uma referência atualizada aos desenvolvimentos e apontando as direções futuras no campo da modelagem do motor. Na presente dissertação são abordadas a modelagem e a avaliação do *spray*, assim sendo, são apresentadas em seguida as equações empregadas na modelagem.

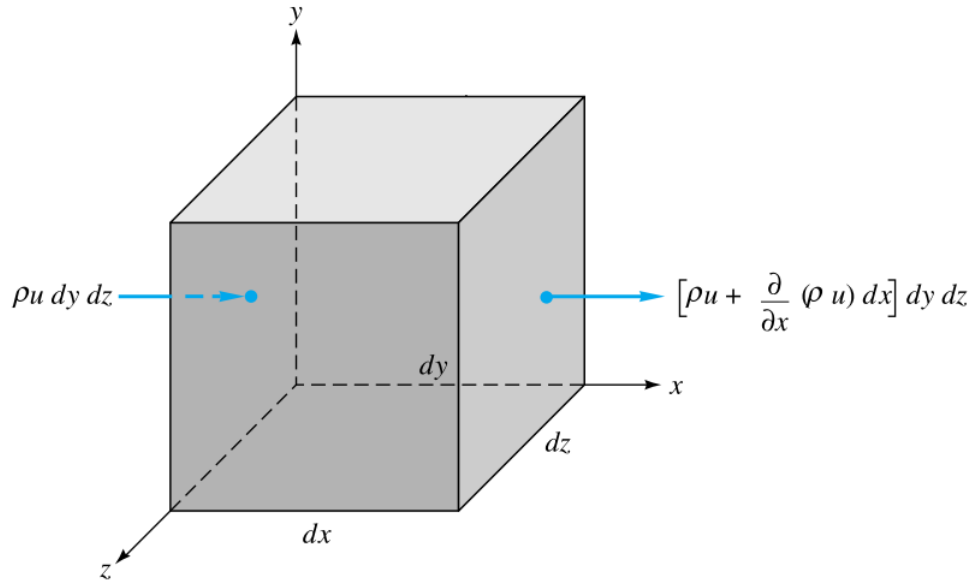
2.1.3.1.1 As equações que governam o escoamento

O cálculo de concentração, velocidade, pressão, temperatura e propriedades turbulentas é efetuada através da solução das equações que governam o escoamento, empregando os princípios de conservação de massa, energia e quantidade de movimento no domínio do espaço e do tempo, por meio de cálculos computacionais, (Versteeg; Malalaskera, 2007).

Na Figura 15 está representado um elemento de volume cúbico no qual está indicado o escoamento do fluido através de duas das suas faces. Dentro desse volume infinitesimal, todas as características do fluido são consideradas uniformemente determinadas em função da posição e do tempo, por exemplo a massa específica ρ é definida como $\rho = \rho(x, y, z, t)$ (White, 2009). Portanto, se T é a temperatura na face esquerda do cubo, ela será infinitesimalmente diferente na face direita e determinada como: $T + (\partial T / \partial x) dx$. Da mesma forma se a quantidade de movimento (ρu) é conhecido na esquerda então na face da direita ela será $\rho u + (\partial \rho u / \partial x) dx$.

A soma das taxas de variação de todas as variáveis, é zero, desde que não ocorram reações químicas gerando energia ou massa. Portanto, para a conservação de massa temos, para um fluido compressível, a Equação (2.7), em que ρ é a massa específica do fluido e u , v e w as componentes da sua velocidade em x , y e z respectivamente.

Figura 15 – Volume de controle discretizado



Fonte: adaptado de (White, 2009)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0 \quad (2.7)$$

Na Equação (2.8) tem-se a forma compacta da Equação (2.7).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.8)$$

Para um fluido incompressível, por exemplo um líquido, para o qual a densidade (ρ) é constante, tem-se a Equação (2.9)

$$\text{div}(\mathbf{u}) = 0 \quad (2.9)$$

De uma forma geral, para se determinar a taxa de variação de qualquer propriedade do fluido emprega-se a abordagem Lagrangiana, na qual cada propriedade está definida em função da posição (em x, y e z) em um devido tempo (t). Se o valor de uma dada propriedade por unidade de massa é denotado por ϕ , a sua derivada total em função do tempo, $D\phi/Dt$ é determinada pela Equação (2.10).

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \frac{dz}{dt} \quad (2.10)$$

A versão mais compacta da Equação (2.10) é a Equação (2.11).

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\phi \quad (2.11)$$

Na Equação (2.11) $D\phi/Dt$ define a taxa de variação de uma propriedade ϕ por unidade de massa. Para o caso de uma avaliação da taxa por unidade de volume, tem-se a Equação (2.12).

$$\rho \frac{D\phi}{Dt} = \rho \left(\frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\phi \right) \quad (2.12)$$

Seguindo a mesma metodologia aplicada para determinar a conservação de massa, a quantidade de movimento do fluido em cada face de um elemento de volume cúbico do fluido, representado na Figura 15, estão organizados na Tabela 3 em função da velocidade \mathbf{V} .

Tabela 3 – Momento em cada face do elemento cúbico

Face	Momento na face de entrada	Momento na face de saída
x	$\rho u \mathbf{V} \, dy \, dz$	$\left[\rho u \mathbf{V} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \mathbf{V}) dx \right] \, dy \, dz$
y	$\rho v \mathbf{V} \, dx \, dz$	$\left[\rho v \mathbf{V} + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \mathbf{V}) dy \right] \, dx \, dz$
z	$\rho w \mathbf{V} \, dx \, dy$	$\left[\rho w \mathbf{V} + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w \mathbf{V}) dz \right] \, dx \, dy$

Fonte: adaptado de (White, 2009)

Somando todas as forças aplicadas nesse elemento de volume, obtêm-se a Equação (2.13).

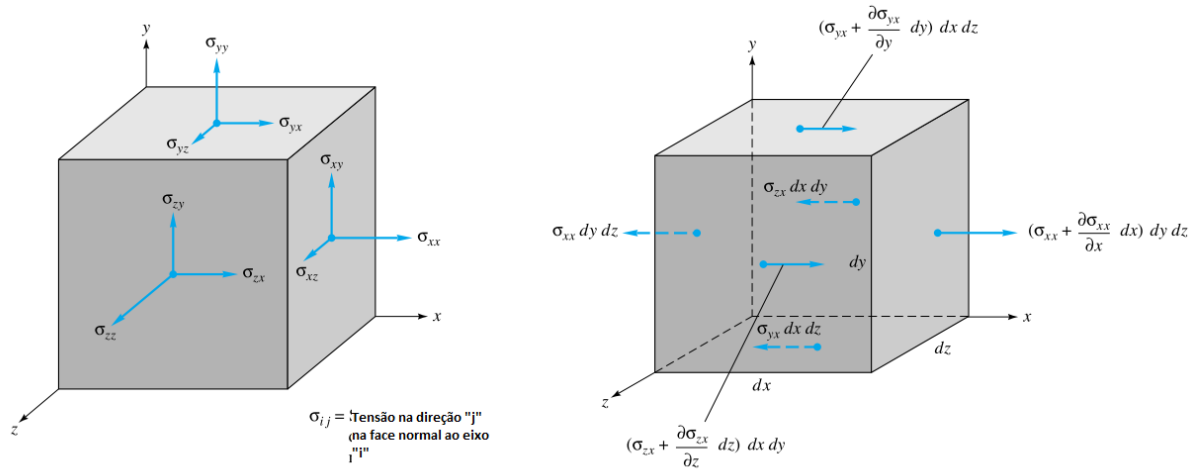
$$\sum \mathbf{F} = \rho \frac{d\mathbf{V}}{dt} \, dx \, dy \, dz \quad (2.13)$$

Em cada volume também deve ser aplicada a força da gravidade, dada pela Equação (2.14):

$$d\mathbf{F}_{gravidade} = \rho \mathbf{g} \, dx \, dy \, dz \quad (2.14)$$

As forças na superfície de cada face do elemento de volume estão representadas na Figura 16. Elas são a soma do vetor de gradiente de pressão com o divergente do tensor de estresse viscoso, τ_{ij} (com o subscrito representando a força na face i na direção j). Assim obtemos o conjunto de equações para a conservação de momento, Equações (2.15), (2.16) e (2.17).

Figura 16 – Volume de controle mostrando as forças superficiais na direção x



Fonte: adaptado de (White, 2009)

$$\rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} = \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) \quad (2.15)$$

$$\rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} = \rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) \quad (2.16)$$

$$\rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} = \rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) \quad (2.17)$$

Para fluidos Newtonianos, a tensão no volume é proporcional à taxa de cisalhamento e ao coeficiente de viscosidade. Então, para fluidos incompressíveis temos as equações de *Navier-Stokes*, Equações (2.18), (2.19) e (2.20).

$$\rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) = \rho \frac{Du}{Dt} \quad (2.18)$$

$$\rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) = \rho \frac{Dv}{Dt} \quad (2.19)$$

$$\rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) = \rho \frac{Dw}{Dt} \quad (2.20)$$

Estas três equações contém 4 incógnitas, p , u , v e w e combinadas com a Equação (2.9), conservação de massa, geram um conjunto de 4 equações para 4 incógnitas.

2.1.3.1.2 Método de Volumes Finitos

O método de volumes finitos, FVM (*Finite Volume Method*), é uma técnica numérica que transforma as equações diferenciais parciais, que representam as leis de conservação em um volume diferencial, em equações algébricas em volumes finitos (ou elementos ou células) (Moukalled; Mangani; Darwish, 2016). De forma similar ao método de Elementos Finitos, o primeiro passo do FVM consiste na discretização do domínio geométrico em elementos que não se sobrepõem ou em volumes finitos. Existem duas maneiras de se obter as equações aproximadas no método dos volumes finitos. A primeira é a realização de balanços da propriedade em questão nos volumes elementares, ou volumes finitos, e a segunda é integrar sobre o volume elementar, no espaço e no tempo as equações na forma conservativa. O sistema de equações algébricas é então resolvido para calcular os valores das variáveis dependentes em cada elemento de volume.

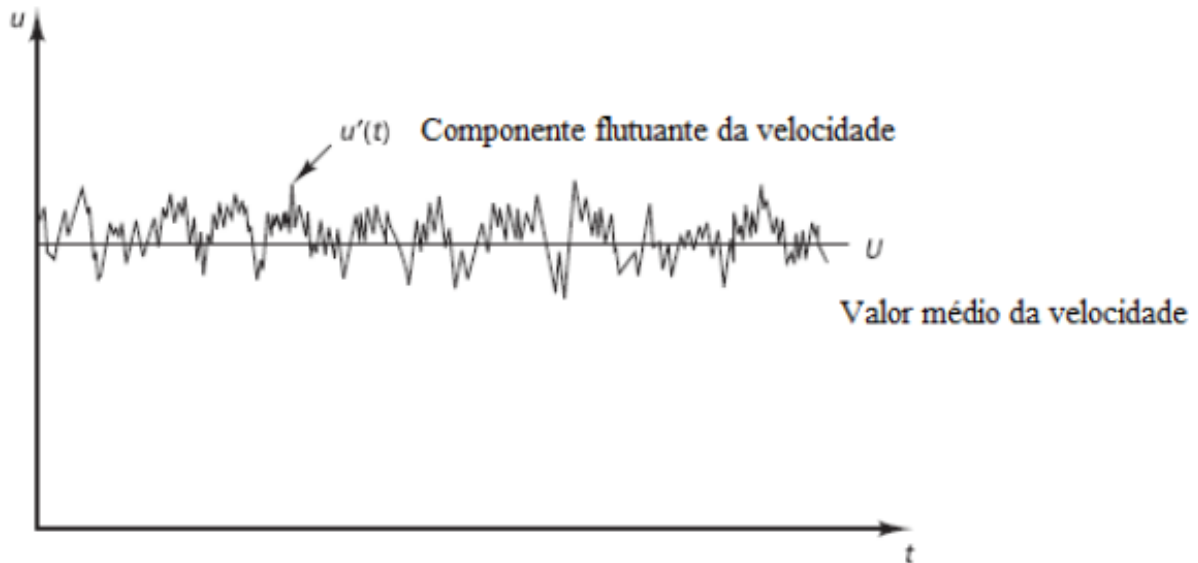
No FVM alguns termos das equações de conservação são transformados em fluxos e avaliados nas faces dos volumes finitos (Moukalled; Mangani; Darwish, 2016). Como o fluxo que entra em qualquer volume é igual ao fluxo de saída do volume adjacente, o FVM é estritamente conservativo. Essa característica o coloca como o método de escolha para CFD. Outro atributo importante do FVM é que ele pode ser formulado no espaço físico em malhas não estruturadas poligonais.

Essas características fazem do método de volumes finitos uma ótima ferramenta para simulações numéricas de várias aplicações envolvendo escoamento de fluido, troca de massa e de calor. A evolução do método também está ligada aos avanços do CFD. A maioria das simulações CFD, inclusive as do presente trabalho, são baseadas nesse método.

2.1.3.1.3 Modelos de Turbulência

Conforme (Versteeg; Malalaskera, 2007) a turbulência é caracterizada por movimentos intrinsecamente instáveis que levam a mudanças nas características do escoamento, mesmo quando submetido a condições de contorno constantes, como por exemplo: se for estabelecida uma velocidade constante de entrada de um fluido em um duto, teremos turbulência no escoamento, salvo a exceção de regimes com baixo número de Reynolds. O regime de escoamento turbulento acontece quando o número de Reynolds calculado para o fluido atinge um valor crítico. A velocidade e as demais propriedades físicas do escoamento variam de forma aleatória e caótica. Além disso, esses escoamentos apresentam estruturas rotacionais, vórtices turbulentos, com diferentes comprimentos de escalas. Devido à natureza aleatória do escoamento turbulento, a descrição das propriedades físicas do mesmo é realizada empregando um valor médio constante e uma componente flutuante. A soma dessas duas componentes descreve a propriedade. A Figura 17 apresenta uma medição típica da velocidade de um escoamento turbulento.

Figura 17 – Representação do valor médio e da componente flutuante de uma propriedade física no escoamento turbulento



Fonte: adaptado de (Versteeg; Malalaskera, 2007)

Entre os métodos numéricos desenvolvidos para estudar os efeitos importantes da turbulência se destacam os principais:

- Equações das médias de Reynolds e Navier– Stokes (RANS);
- As equações de *Large Eddy Simulation* (LES);
- Solução direta das equações de Navier-Stokes, *Direct Numerical Simulation* (DNS).

O método DNS requer que a malha computacional gerada seja extremamente refinada, pois calcula todas as equações do escoamento e as flutuações de velocidade presentes, inclusive resolvendo o escoamento onde ocorre a dissipação em calor. Também possibilita a discretização no tempo com passo de tempo suficientemente pequeno para resolver e calcular as mais rápidas flutuações do escoamento (Ribeiro, 2014). Esse modelo é considerado de alta precisão, por alcançar resultados mais próximos dos fenômenos reais. No entanto, devido ao alto custo computacional, não é utilizado para aplicações industriais, mas sim no meio acadêmico, sendo utilizado muitas vezes para a validação de códigos para CFD (ROACHE, 2002).

Os método LES também exigem uma malha computacional refinada, mas são uma forma intermediária na modelagem numérica, pois seu objetivo principal é calcular os grandes vórtices (Ribeiro, 2014). O cálculo dos grandes vórtices é possível com boa precisão

porque o método utiliza um filtro computacional no espaço, o que permite realizar os cálculos de maneira direta, exceto dos menores vórtices nas escalas de dissipação. Os efeitos gerados no escoamento pelos vórtices menores são modelados através de *Sub-Grid Scales* (SGS), modelos que conseguem calcular e prever o comportamento do escoamento nos vórtices menores sem grandes erros, por já se encontrarem em escala de dissipação, com comportamento isotrópico e modelagem linear. Uma das desvantagens do método LES é que apenas casos transientes podem ser resolvidos, aumentando os custos computacionais. Com a evolução da computação do processamento de dados e da capacidade de memória, esse método vem sendo mais utilizado, principalmente no meio acadêmico, para geometrias muito complexas, onde outros modelos não são suficientemente precisos, para representar os fenômenos que requerem que as flutuações no tempo da velocidade sejam calculadas (Versteeg; Malalaskera, 2007). No caso de motores de combustão interna, a vantagem de se simular com o modelo LES de turbulência é a possibilidade de avaliar variações da mistura de ar-combustível, comparativamente ciclo a ciclo, fator importante para os motores mais modernos.

Como é muito difícil obter a capacidade computacional necessária para simulações com métodos DNS e LES, a alternativa mais comum e ainda eficiente é a utilização de métodos RANS, que são baseados nas médias de Reynolds das equações de Navier-Stokes. Os métodos RANS demandam menos custos computacionais que os outros disponíveis e podem modelar escoamentos adequadamente com boa correlação experimental. Existem vários modelos de cálculo que se encaixam na classe RANS, mas os mais comuns são da família $k-\epsilon$ e da família $k-\omega$. Cada família emprega modelos de cálculo específicos, que são normalmente variações entre eles, na maioria das vezes diferindo por algumas constantes. Dentre todos os modelos existentes, o mais citado na literatura para simulação de motores será aqui introduzido.

O modelo $k-\epsilon$ *realizable* é um modelo de cálculo relativamente novo, muito utilizado para escoamentos turbulentos, onde k representa a energia cinética turbulenta e ϵ a taxa de dissipação dessa energia turbulenta. Ou seja, k representa a energia turbulenta e ϵ a taxa de dissipação desta energia. Esse é um modelo que se diferencia dos demais, principalmente do padrão, pois está de acordo com as restrições matemáticas nas tensões de Reynolds, o que o torna mais consistente com a física da turbulência (Ribeiro, 2014). O modelo $k-\epsilon$ *realizable*

Esse modelo tem sido empregado em trabalhos que envolvem simulações de sistemas com elevados números de Reynolds, nas quais se incluem motores e injeção de combustível.

Esse modelo se destaca, em relação aos outros modelos RANS por representar melhor a transferência de energia dos vórtices maiores para os menores, como mostram as Equações (2.21) a (2.29) (Ribeiro, 2014).

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k \bar{u}_l)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + \rho \epsilon \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \epsilon \bar{u}_l)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S_\epsilon - \rho C_2 \frac{\epsilon^2}{k + \sqrt{\nu \epsilon}} \quad (2.22)$$

Onde,

$$C_1 = \max \left[0, 43; \frac{\eta}{\eta + 5} \right] \quad (2.23)$$

$$\eta = S \frac{k}{\epsilon} \quad (2.24)$$

$$S = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \quad (2.25)$$

As Equações 2.21 e 2.22 não possuem muitas diferenças em relação ao modelo padrão k - ϵ , mas o termo de dissipação sim. O termo de produção na equação de ϵ não envolve produção de k .

Uma outra diferença neste modelo está no método como é calculada a viscosidade turbulenta, C_μ , através da Equações 2.26 e 2.26.

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.26)$$

$$C_\mu = \frac{1}{4.04 + A_s \frac{k U^*}{\epsilon}} \quad (2.27)$$

Onde,

$$U^* \equiv \sqrt{S_{ij} S_{ij} + \tilde{\Omega}_{ij} \tilde{\Omega}_{ij}} \quad (2.28)$$

$$\tilde{\Omega}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.29)$$

Dessa forma, podemos ver que C_μ é função dos tensores de taxa de deformação e de rotação além da velocidade angular de rotação dos sistemas e dos parâmetros de turbulência k e ϵ , por ser dependente da direção, a viscosidade turbulenta neste modelo é anisotrópica. (Ribeiro, 2014 apud Smits, 2006) mostrou que escoamentos envolvendo vórtices e escoamentos rotacionais são adequadamente descritos utilizando este modelo. A caracterização numérica dos vórtices fica muito próxima de resultados experimentais. (Amorim, 2016) também obteve bons resultados na modelagem de *spray* e de ICE utilizando esse modelo.

2.1.3.2 Propriedades dos Fluidos

As propriedades de cada fluido presente na simulação são determinadas por um conjunto de polinômios dependentes da Temperatura e da Pressão. Essa metodologia que foi aplicada no presente trabalho se baseia em trabalhos realizados na NASA e com o *software* CHEMKIN (Chemical, 2000).

Para as grandezas termodinâmicas, como entalpia (H), entropia (S) e calor específico (C_p) tem-se as Equações (2.30), (2.31), (2.32), onde T é a temperatura em Kelvin, R a constante universal dos gases e a_i são constantes definidas inicialmente para cada fluido para uma determinada faixa de temperatura.

$$\frac{C_{pk}^0}{R} = a_{1k} + a_{2k}T_k + a_{3k}T_k^2 + a_{4k}T_k^3 + a_{5k}T_k^4 \quad (2.30)$$

$$\frac{H_k^0}{RT_k} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2}T_k + \frac{a_{3k}}{3}T_k^2 + \frac{a_{4k}}{4}T_k^3 + \frac{a_{5k}}{5}T_k^4 + \frac{a_{6k}}{T_k} \quad (2.31)$$

$$\frac{S_k^0}{R} = a_{1k} \ln T_k + a_{2k}T_k + \frac{a_{3k}}{2}T_k^2 + \frac{a_{4k}}{3}T_k^3 + \frac{a_{5k}}{4}T_k^4 + a_{7k} \quad (2.32)$$

As demais propriedades físicas dos fluidos são calculadas a partir dos valores encontrados de C_{pk}^0 , H_k^0 e S_k^0 , o sobrescrito “0” se refere ao estado padrão a 1 atmosfera.

Para gases ideais, o estado padrão do calor específico, da entalpia, e da energia interna são os valores específicos e o subscrito não é mais necessário.

Para calcular as propriedades termodinâmicas de uma mistura de K componentes é necessário determinar a soma das propriedades das substâncias básicas que compõem a mistura. Os valores médios de calor específico a pressão constante (C_p) e a volume constante (C_v) do k -ésimo componente, são determinados pelas Equações (2.33), (2.34), (2.35), (2.36), onde Y_k é a fração mássica do k -ésimo componente, X_k é a fração molar do k -ésimo componente e \bar{W} é a massa molecular média do k -ésimo componente.

$$\bar{C}_p = \sum_{N=1}^K C_{pk} X_k \quad (2.33)$$

$$\bar{c}_p = \sum_{N=1}^K c_{pk} Y_k = \bar{C}_p / \bar{W} \quad (2.34)$$

$$\bar{C}_v = \sum_{N=1}^K C_{vk} X_k \quad (2.35)$$

$$\bar{c}_v = \sum_{N=1}^K v_{pk} Y_k = \bar{C}_v / \bar{W} \quad (2.36)$$

Para as entalpias tem-se as Equações (2.37), (2.38),

$$\bar{H} = \sum_{N=1}^K H_k X_k \quad (2.37)$$

$$\bar{h} = \sum_{N=1}^K h_k Y_k = \bar{H}/\bar{W} \quad (2.38)$$

E a energia total é determinada pelas Equações (2.39) e (2.40),

$$\bar{U} = \sum_{N=1}^K U_k X_k \quad (2.39)$$

$$\bar{u} = \sum_{N=1}^K u_k Y_k = \bar{U}/\bar{W} \quad (2.40)$$

As grandezas de entropia (S), Energia Livre de Gibbs (G) e Helmholtz (A) são calculadas de forma diferente. Nesses casos é preciso determinar a pressão e a entropia das misturas corretas (Chemical, 2000). A entropia é calculada pelas Equações (2.41) e (2.42).

$$\bar{S} = \sum_{N=1}^K \left(S_k^0 - R \ln X_k - R \ln P/P_{atm} \right) X_k \quad (2.41)$$

$$\bar{s} = \frac{\bar{S}}{\bar{W}} \quad (2.42)$$

De forma similar, as energias livres de Gibbs e de Helmholtz da mistura são calculadas pelas Equações (2.43), (2.44), (2.45) e (2.46).

$$\bar{G} = \sum_{N=1}^K \left[H_k - T_k \left(S_k^0 - R \ln X_k - R \ln P/P_{atm} \right) \right] X_k \quad (2.43)$$

$$\bar{g} = \frac{\bar{G}}{\bar{W}} \quad (2.44)$$

$$\bar{A} = \sum_{N=1}^K \left[U_k - T_k \left(S_k^0 - R \ln X_k - R \ln P/P_{atm} \right) \right] X_k \quad (2.45)$$

$$\bar{a} = \frac{\bar{A}}{\bar{W}} \quad (2.46)$$

2.1.3.3 Parâmetros numéricos

O número de Courant depende da velocidade, passo de tempo (tempo físico entre cada instante da solução do problema) e do comprimento característico da célula, que nesse caso corresponde ao tamanho de referência do volume. O número de Courant Friedrichs Lewy (CFL) está definido para a direção x na Equação (2.47).

$$CFL = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \quad (2.47)$$

Em que Δt o passo de tempo e Δx o comprimento de referência da célula, que nesse caso foi na direção x .

Esse número é um dos controles necessários para a convergência dos resultados. Por exemplo, se o número de Courant é igual a 1, a cada passo de tempo do cálculo uma partícula atravessaria uma célula. Caso o CFL seja maior do que 1, a cada passo de tempo essa mesma partícula atravessaria mais de uma célula. Se isso ocorrer informações do escoamento podem se perder. Para números de Courant muito altos, a convergência pode ser dificultada. Uma boa maneira de se controlar o número de Courant, especialmente quando a malha é constante e estática e o escoamento é plenamente desenvolvido, é alterar o valor do passo de tempo (Amorim, 2016). É importante ressaltar que o controle do CFL é feito com o objetivo de manter a exatidão da solução e não sua estabilidade (Senecal; Pomraning; Richards, 2013).

Em análises muito complexas, onde o número de Courant pode chegar a valores muito altos, seu controle por meio de diminuição do passo de tempo pode resultar em aumento significativo dos custos computacionais, o que pode até inviabilizar uma simulação (Amorim, 2016).

2.1.4 Modelagem do Spray

Para determinar a massa de combustível correta no cilindro, a massa de todas as gotículas deve ser calculada, com um custo computacional elevado da simulação numérica de todas as gotas de um *spray*. Devido a isso, é feita uma simplificação do modelo, pressupondo que as propriedades e o comportamento de todas as gotículas no *spray* podem ser aproximadamente representados por gotas discretas. Assim, cada gota representativa gera um grupo de gotículas adicionais com tamanho, temperatura e velocidade idênticos, que têm exatamente o mesmo comportamento e propriedades das gotas do *spray*. Os grupos de gotas iguais são chamados de *parcels*, (Baumgarten, 2006), e um *spray* líquido é representado por um *parcel* ou um conjunto de *parcels* diferentes, com cada *parcel* contendo uma série de gotas com características idênticas, caracterizadas pelo mesmo diâmetro, velocidade, pressão, temperatura, etc. Cada *parcel* é acompanhado usando a abordagem Lagrangiana, e suas as gotículas trocam energia, momento e calor com o gás do domínio,

devido à dispersão turbulenta, colidindo com outras gotículas, sofrendo quebra secundária e evaporação, (Huang; Lipatnikov, 2004).

Para simular esses processos, são necessários vários modelos, em particular: (i) um modelo de injeção de líquido; (ii) um modelo de atomização primária; (iii) um modelo de influência de gotículas sobre o movimento do gás; (iv) um modelo de influência do escoamento de gás turbulento em uma gota; (v) um modelo de colisão de gotículas e coalescência; (vi) um modelo de quebra secundária; (vii) um modelo de evaporação.

No OpenFOAM, o método Lagrangiano discreto é usado para acompanhar o *spray* com uso dos *parcels*. No presente trabalho é feita a avaliação dos vários modelos de injeção de líquido, atomização de gotículas primárias, ruptura secundária e colisões, implementadas no OpenFOAM. Os modelos padrão de escoamento turbulento multifase, e evaporação empregados são adaptados de trabalhos do grupo de CFD do Centro da Tecnologia da Mobilidade (CTM), (Mayer, 2012), (Rocha, 2015) e (Amorim, 2016).

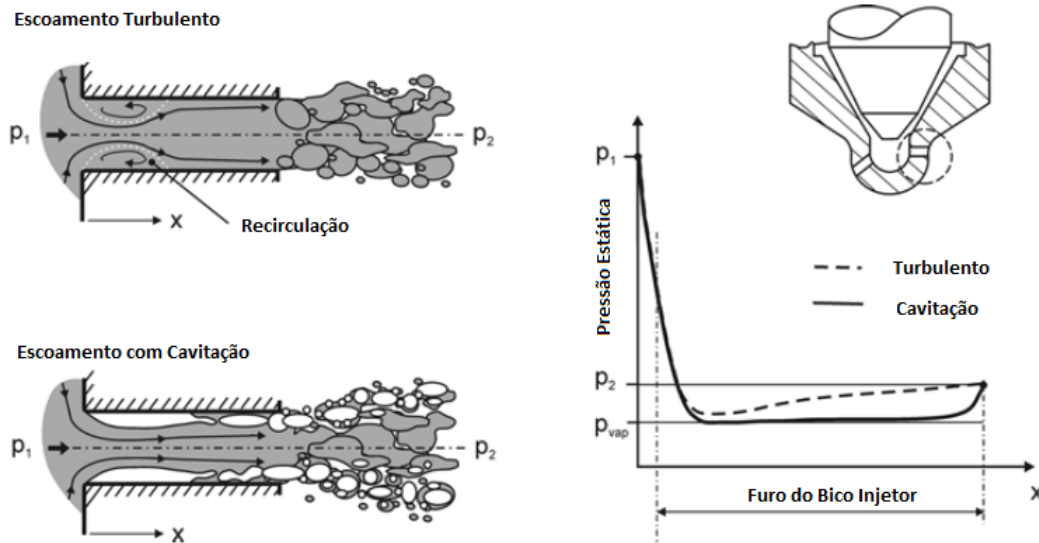
2.1.4.1 Modelos do *Break-Up*

O *Break-Up* primário de um jato de um líquido em gotas ocorre logo após a saída do líquido do bico injetor, devido à cavitação e/ou a turbulência do injetor, como apresentado na Figura 18. A cavitação é um fenômeno físico que consiste na formação de bolhas de vapor no meio do fluido, quando a pressão absoluta local é inferior a pressão de vapor do líquido. Em seguida ocorre a quebra secundária das gotas, quando as gotas iniciais se desintegram em gotículas de raio menor, devido a forças aerodinâmicas (pressão e arrasto) induzidas pela velocidade relativa das gotículas com relação ao gás circundante. Essas forças aerodinâmicas levam ao aumento da instabilidade na superfície das gotículas provocando a sua quebra. Em oposição a essas forças, a tensão superficial tenta manter as gotas esféricas neutralizando sua deformação (Braga et al., 2017).

No presente trabalho são tratados os modelos de *Break-Up*, TAB, LISA, Reitz Diwakar, KHRT. Dentre os parâmetros importantes obtidos de experimentos estão: o posicionamento e a área do bico injetor, a direção da injeção (por exemplo, o ângulo de *spray*, θ , uniformemente e aleatoriamente distribuído entre o ângulo interior e o ângulo exterior do cone do *spray*), a temperatura e a composição do combustível injetado, a massa total injetada (m) e a pressão de injeção (p_{inj}). Um dos modelos utilizados para descrever o *break-up* primário é o da função de densidade de probabilidade, PDF (*Probability Density Function*), *Rosin-Rammler*.

Na distribuição de *Rosin-Rammler*, a distribuição cumulativa de volume, V , é dada pela Equação (2.48) e a distribuição correspondente de volume é dada pela Equação (2.49), onde D é o tamanho das gotas individuais e q é o parâmetro de distribuição, (Baumgarten, 2006). De acordo com (Law et al., 2001) o valor de q é aproximadamente 3,5.

Figura 18 – Escoamento com e sem cavitação no furo do bico injetor



Fonte: adaptado de (Baumgarten, 2006)

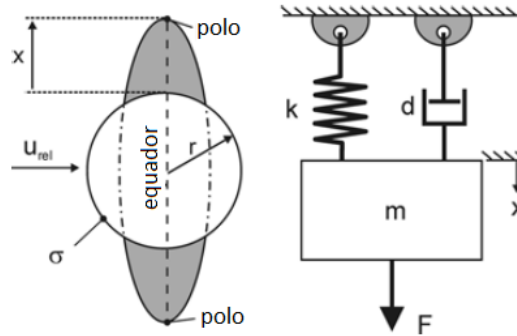
$$V = 1 - \exp\left(-\left(\frac{D^q}{\bar{D}}\right)\right) \quad (2.48)$$

$$\frac{V}{D} = \frac{qD^{q-1}}{\bar{D}^q} \exp\left(-\left(\frac{D^q}{\bar{D}}\right)\right) \quad (2.49)$$

No trabalho de (Almeida et al., 2016) é feita uma avaliação de dois métodos disponíveis para modelar as distribuições de tamanho de gota no *spray* de combustível: o método clássico empírico e o método de *Rosin Rammler*. Uma investigação numérica foi realizada utilizando as capacidades do código OpenFOAM para avaliar a forma característica do fluido no *spray*. Os resultados mostraram que ambas as distribuições são bem implementadas no *software* e o modelo de *Rosin Rammler* é o que melhor reproduz a distribuição de gotículas de *spray*.

O modelo TAB, *Taylor Analogy Break-up*, proposto por O'Rourke e Amsden, é baseado na analogia entre cada gota e um oscilador de massa m que atravessa uma atmosfera gasosa com velocidade relativa u_{rel} , (Ghadimi; Yousefifard; Nowruzi, 2016). Como mostrado na Figura 19, a força F que inicia a oscilação da massa corresponde às forças aerodinâmicas que deformam a gota e a força de restauração $F_{spring} = kx$ é análoga à força de tensão superficial, que tenta manter a gota esférica e minimiza sua deformação. A força de amortecimento $F_{amortecimento} = c\dot{x}$ corresponde às forças de atrito dentro da gota devido à viscosidade dinâmica μ_l do líquido.

O modelo TAB é conhecido por ter sido empregado na predição de tamanhos de gotículas de *spray* de diesel de cone completo (Liu; Mather; Reitz, 1993) e subestimar a

Figura 19 – Modelagem TAB, *Taylor-Analogy break-up*

Fonte: adaptado de (Baumgarten, 2006)

penetração quando combinado com o método *blob*, no qual a injeção dos *parcels* é feita por um único aglomerado de diâmetro igual ao do bico injetor, (Allocca et al., 2002). Atualmente, o modelo TAB perdeu sua posição de liderança na predição de divisão de *spray* de diesel, mas é usado para prever a deformação das gotículas (independente da ruptura), que é necessária para calcular o coeficiente de arrasto dinâmico das gotículas em um *spray* (Liu; Mather; Reitz, 1993). Em contraste com as simulações de *spray* diesel, o modelo TAB é o modelo de *break-up* secundário mais importante para descrever o *spray* de gasolina de cone oco.

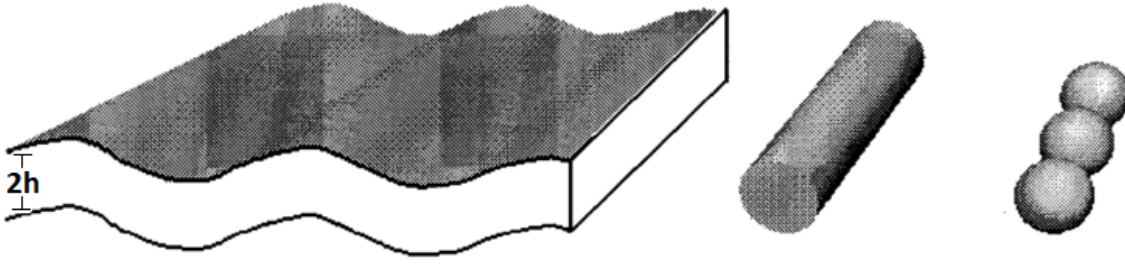
O modelo LISA, *Linearized Instability Sheet Atomization*, descreve o crescimento de perturbações em uma superfície líquida devido à instabilidade Kelvin-Helmholtz como a força motriz da atomização primária (Huang; Lipatnikov, 2011). Nesse modelo o processo de fragmentação é dividido em três estágios: formação de filme na superfície líquida, separação do filme de folhas e atomização (Shim; Choi; Kim, 2008). A Equação (2.50) descreve a relação entre o vazão mássica \dot{m} e a espessura do filme $2h$.

$$\dot{m}(t - \tau) = 4 \pi \rho_f X h U \quad (2.50)$$

Em que, U é a magnitude da velocidade do filme de líquido em relação a velocidade do gás circundante, $\dot{m}(t - \tau)$ é a vazão mássica de combustível injetada $\tau = X/V$ segundos antes do *break-up*, onde \dot{m} está em função de $(t - \tau)$. Outras variáveis são a distância percorrida do filme de líquido X e a magnitude da velocidade dessa película V , ou lâmina, de líquido (Huang, 2014), importante destacar que nem sempre $V = U$.

(Senecal et al., 1999) estudaram a desintegração de um filme líquido de espessura $2h$, descrevendo a quebra da estabilidade linear desse filme como perturbações ondulatórias infinitesimais de onda na sua superfície, Figura 20. Foram obtidas relações entre a taxa de crescimento da amplitude da perturbação, ω , e o seu número de onda, K , para dois modos de instabilidade, um sinuoso e o outro variável. Uma investigação numérica simplificada

Figura 20 – Esquema da desintegração de uma lâmina de fluido em gotas



Fonte: adaptado de (Senecal et al., 1999)

mostrou que cada curva de $\omega(K)$ apresenta um único pico, que corresponde ao valor máximo da taxa de crescimento da amplitude da perturbação. Esse valor é maior no modo sinuoso que no modo variável quando o número de Weber, We , é pequeno, ou igual ao do modo variável, quando We é elevado. O modelo LISA descreve exclusivamente o modo sinuoso.

Finalmente, com base no resultado teórico dos trabalhos de (Schmidt et al., 1999) e de (Senecal et al., 1999), foi proposto o seguinte modelo de *break-up* de uma lâmina de líquido:

O *break-up* ocorre quando o valor máximo da amplitude da onda de perturbação crescente alcança um valor crítico η_b . No caso de ondas curtas, $We_g > 27/16$, essa amplitude de onda de perturbação é calculada pela Equação 2.51.

$$\omega = 2 - \nu_g k^2 + \sqrt{4\nu_g^2 k^4 + Q + U^2 + k^2 - \frac{\sigma k^3}{\rho_f}} \quad (2.51)$$

Em que, $Q = \rho_g/\rho_f$, ρ_f é a massa específica do combustível, ρ_g a massa específica do gás circundante, σ a tensão superficial do fluido. Como ω não depende da espessura do filme líquido, o crescimento da amplitude da perturbação é modelado pela Equação 2.52.

$$\eta(t) = \eta_0 \exp(\Omega_s t) \quad (2.52)$$

Em que, para ondas curtas, Ω_s é a taxa máxima da amplitude da onda calculada pela Equação 2.51.

Consequentemente, o tempo de *break-up*, τ_s , e a escala de comprimento, L_s (*length scale*), que equivale à distância que o filme percorre até o *break-up*, são calculados pelas Equações 2.53 e 2.54.

$$\tau_s = \frac{1}{\Omega_s} \ln \frac{\eta_b}{\eta_0} \quad (2.53)$$

$$L_s = \frac{U_{inj}}{\Omega_s} \ln \frac{\eta_b}{\eta_0} \quad (2.54)$$

Com base no trabalho de Dombrowski e Hooper, o valor de $\ln \frac{\eta_b}{\eta_0}$ é tomado como 12 (Lucchini; Errico; Nordin, 2005).

A velocidade de injeção total U_{inj} é definida como a diferença entre a pressão de injeção e a contrapressão da câmara, ou seja, é a velocidade absoluta da lâmina de líquido e deve ser diferenciada da quantidade U que representa a velocidade relativa entre o líquido e o gás.

No caso de ondas longas, $We_g < 27/16$, o valor máximo da amplitude da onda de perturbação é calculada pela Equação 2.55.

$$w = \sqrt{\frac{QU_{inj}^2 k}{h} - \frac{\sigma k^2}{\rho_f h}} \quad (2.55)$$

Quando a Equação 2.56 é satisfeita, a taxa máxima de crescimento é calculada pela Equação 2.57.

$$K_s = \frac{\rho_g U_{inj}^2}{2\sigma} \quad (2.56)$$

$$\Omega_l = \frac{\rho U_{inj}}{2\sqrt{\rho_f \sigma h}} \quad (2.57)$$

A taxa de crescimento de ondas longas depende da espessura da lâmina de líquido, que diminui com a distância, X , entre o lâmina e o bico do injetor devido à conservação de massa. A Equação 2.58, determina o parâmetro L , que determina o *break-up*, onde J é uma constante dimensional.

$$L_l = U\tau_l = V \left[3 \ln \frac{\eta_b}{\eta_0} \right]^{2/3} \left(\frac{\rho_f \sigma J}{\rho_g^2 U_{inj}^4} \right)^{1/3} \quad (2.58)$$

Quando a distância X se torna maior do que L_s , para perturbação de ondas curtas ($We_g > 27/16$), ou L_l , para perturbação de ondas longas ($We_g < 27/16$), o filme se quebra formando ligamentos longos, como mostrado na Figura 20. O diâmetro d_L dos ligamentos é calculado supondo que a massa é conservada e que um ligamento é formado por uma perturbação de onda curta e que dois ligamentos são formados por perturbação de onda

longa. A Equação 2.59 para $We_g > 27/16$ e a Equação 2.60 para $We_g < 27/16$ determinam o valor do diâmetro dos ligamentos.

$$d_L = \sqrt{\frac{16h}{K_s}} \quad (2.59)$$

$$d_L = \sqrt{\frac{8h}{K_s}} \quad (2.60)$$

Em que K_s é calculado pela Equação 2.56 e a espessura da lâmina do líquido, $2h$, pode ser estimada pela Equação 2.50.

Em seguida, com a análise de estabilidade, calcula-se a desintegração dos ligamentos em gotas. O *break-up* ocorre quando a amplitude das ondas de perturbação é igual ao raio do ligamento e então uma gota é formada por comprimento de onda. O raio dessa nova gota r é calculado pelas Equações (2.61) e (2.62).

$$r^3 = \frac{3\pi d_L^2}{8K_w} \quad (2.61)$$

$$K_w d_L = \left(\frac{1}{2} + \frac{3\rho_f \nu_f}{2\sqrt{\rho_f \sigma d_L}} \right)^{-1/2} \quad (2.62)$$

Com as Equações (2.63) e (2.64), é possível determinar a velocidade total de injeção, U_{inj} , em função da pressão de injeção, p_{inj} , e a massa específica do líquido injetado ρ_f .

$$U_{inj} = k_w \sqrt{\frac{2(p_{inj} - p_a)}{\rho_f}} \quad (2.63)$$

$$k_w = \min \left\{ 1; \max \left[0, 7; \frac{\dot{m}}{\rho_f A_i \cos(\theta)} \sqrt{\frac{\rho_f}{2(p_{inj} - p_a)}} \right] \right\} \quad (2.64)$$

Os modelos de *break-up* secundário são projetados para simular a formação de gotículas menores na região a jusante de um *spray*. A quebra secundária pode ser aproximada a um processo de redução contínua do raio, r , da gota, Equação (2.65), em um modelo conhecido como o modelo *Reitz-Diwakar*.

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{r - r_{RD}}{\tau_{RD}} \quad (2.65)$$

A Equação (2.65) obedece as relações empíricas dadas pela Equação (2.66) e Equação (2.67) quando $We_g > 0,5\sqrt{Re_g}$, e pela Equação (2.68) e Equação (2.69) quando $6 < We_g < 0,5\sqrt{Re_g}$ e o raio de gotícula é considerado como constante se $We_g < 6$.

$$\tau_{RD} = B_{RD} \frac{r}{U} \sqrt{\frac{\rho_f}{\rho_g}} \quad (2.66)$$

$$r_{RD} = \frac{\sigma^2}{2\rho_g U^3 \nu_g} \quad (2.67)$$

$$\tau_{RD} = \pi \sqrt{\frac{\rho_f r^3}{2\sigma}} \quad (2.68)$$

$$r_{RD} = \frac{6\sigma}{\rho_g U^2} \quad (2.69)$$

W_e e Re são os números Weber e Reynolds, respectivamente, ambos calculados para a fase gasosa, pelas Equações (2.5) e (2.4). ρ é a massa específica e σ é o coeficiente de tensão superficial do fluido em relação ao gás da câmara, 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 (Huang, 2014).

Outro modelo aplicável para o *Break-Up* secundário é o modelo *Kelvin-Helmholtz / Rayleigh-Taylor*, abreviado como KHRT. Esse modelo considera que a separação de gotículas é causada pelo crescimento de duas instabilidades, a de KH descrita pelo modelo de onda e a de RT que se desenvolve na superfície da gotícula sob a influência da aceleração do escoamento.

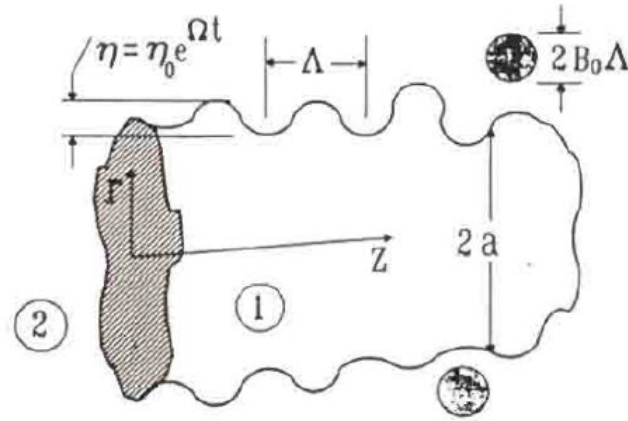
O modelo de *Kelvin-Helmholtz* emprega uma abordagem similar à estabilidade de *Reitz Diwakar*. (Huang, 2014) *apud* Reitz et. al (1987) derivou uma aproximação numérica para a taxa máxima de crescimento da onda de perturbação Ω_{KH} e seu comprimento de onda, Λ_{KH} , Equações 2.70 e 2.71.

$$\Omega_{KH} = \frac{0,34 + 0,38W_e^{1,5}}{(1+Z)(1+1,4T^{0,6})} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_f r^3}} \quad (2.70)$$

$$\frac{\Lambda_{KH}}{r} = 9,02a \frac{(1+1,45z^{0,5})(1+1,4T^{0,7})}{(1+0,87W_e^{1,67})^{0,6}} \quad (2.71)$$

Onde, $T = Z\sqrt{W_e}$ é o número de Taylor e os subscritos g e f se referem ao gás e ao fluido, respectivamente. A Figura 21 ilustra o mecanismo de quebra KH, onde 2 representa o gás e 1 a fase gasosa do fluido e o subscrito representa também essa fase.

Mantendo a recomendação de Reitz e Diwakar, a taxa de redução do tamanho das gotas do modelo de *break up* KH se assemelha bastante com a taxa determinada pela Equação 2.65, e o novo raio da gota baseado na instabilidade de *Kelvin-Helmholtz* é calculado pela Equação 2.72.

Figura 21 – Mecanismo de *Break-up* KH

Fonte: adaptado de (Braga et al., 2017) *apud* Reitz et. al (1987)

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{a - r_{KH}}{\tau_{KH}} \quad (2.72)$$

Onde a é o raio do jato cilíndrico, e o parâmetro de relaxação de tempo, τ_{KH} , é calculado pela Equação 2.73 e o raio das novas gotas formadas pelas ondas com a maior taxa de crescimento, r_{KH} , pela Equação 2.74, se r_{KH} for menor que o raio da gota inicial.

$$\tau_{KH} = 3,726 B_1 \frac{r}{\Omega_{KH} \Lambda_{KH}} \quad (2.73)$$

$$r_{KH} = B_0 \Lambda_{KH} \quad (2.74)$$

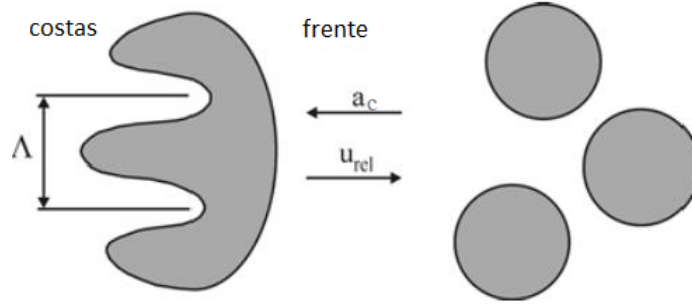
Se r_{KH} for maior que o raio da gota inicial, $B_0 \Lambda_{KH} > r$, então r_{KH} é calculado pela Equação 2.75.

$$r_{KH} = \left[\frac{3r^2 \min\{\Lambda_{KH}, 2\pi U / \Omega_{KH}\}}{4} \right]^{1/3} \quad (2.75)$$

Nesse modelo, a massa removida da gota principal, ou inicial, é acumulada até que esse valor atinja um valor especificado. Normalmente é utilizado o valor de 3 a 5% ($f_{KHbirth}$) da massa do *parcel* injetado. O novo *parcel* adicionado ao domínio computacional tem a componente de velocidade, v_N , normal ao caminho do *parcel* original calculada pela Equação 2.76, onde C_1 é uma constante, cujo valor normalmente adotado é 0,188.

$$v_N = C_1 \Lambda_{KH} \Omega_{KH} \quad (2.76)$$

A instabilidade de Rayleigh Taylor, RT, é introduzida no modelo como uma instabilidade da interface entre dois fluidos com uma aceleração normal, a_c , entre elas,

Figura 22 – Mecanismo de *Break-up* RT

Fonte: adaptado de (Baumgarten, 2006)

conforme mostrado na Figura 22. Nesse caso, o número de onda (K_{RT}), o comprimento de onda (Λ_{RT}) e a taxa de crescimento (Ω_{RT}) (Bellman, R., Pennington, 1953) são determinadas pelas Equações 2.78, 2.77 e 2.79.

$$\Lambda_{RT} = \frac{2\pi C_{RT}}{K_{RT}} \quad (2.77)$$

Com C_{RT} uma constante, reportada em (Huang, 2014) *apud* Reitz (1999), cujo valor é igual a 5,33.

$$K_{RT} = \sqrt{\frac{-a_c(\rho_f - \rho_g)}{3\sigma}} \quad (2.78)$$

$$\Omega_{RT} = \sqrt{\frac{2}{3\sqrt{3}\sigma} \frac{[-a_c(\rho_f - \rho_g)]^{\frac{3}{2}}}{\rho_f + \rho_g}} \quad (2.79)$$

ρ_g é a densidade do gás do cilindro e a_c aceleração relativa e, que é calculada, segundo (Bellman, R., Pennington, 1953), através da Equação 2.80

$$a_c = -\frac{3}{8}C_D \frac{\rho_g U^2}{\rho_f r} \quad (2.80)$$

A Equação (2.80) relaciona o coeficiente de arrasto, C_D , com a aceleração, onde r é o raio da gota.

O comprimento de onda da onda de perturbação que cresce mais rápido é comparado com o diâmetro da gota, e sendo menor é pressuposto que ocorre o crescimento da onda de perturbação na superfície da gota (Braga et al., 2017). Após o início da instabilidade, quando tempo atinge o valor igual a τ_{RT} , calculado pela Equação 2.81, a quebra da gota ocorre e o raio das novas gotas é calculado pela Equação 2.82.

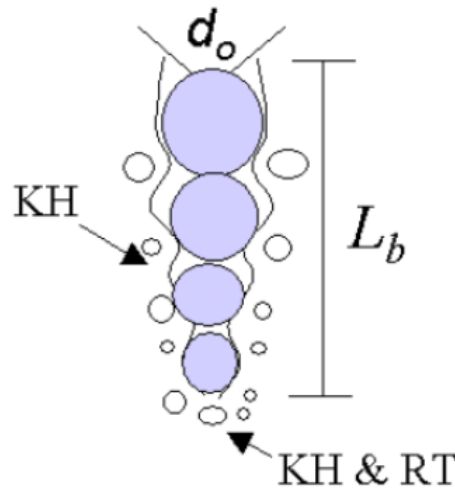
$$\tau_{RT} = \frac{C_\tau}{\Omega_{RT}} \quad (2.81)$$

$$r = C_{RT}\Lambda_{RT} \quad (2.82)$$

A constante C_{RT} é introduzida no modelo para controlar o tamanho do comprimento de onda, assim como no modelo KH foi introduzida a constante B_1 . Aumentando esse valor a ocorrência dos *break-up* diminui, o diâmetro médio das gotas aumenta e consequentemente a penetração também aumenta.

No presente trabalho os modelos KH e RT são utilizados de forma conjunta e concorrentes. Dessa forma, a instabilidade dos dois modelos é calculada simultaneamente. Ou seja, se a instabilidade de RT prevê o *break-up* no passo de tempo atual, a quebra das gotas ocorre de acordo com esse modelo. Se não, o modelo KH será utilizado para calcular os diâmetros das novas gotas. Entretanto, é provável que ocorra a quebra causada pela instabilidade de RT devido as altas velocidades, rapidamente, logo após o início da injeção, próximo ao bico injetor. Então foi implementado um controle para que o modelo RT somente seja adicionado após uma certa distância do bico injetor, L_b , como apresentado na Figura 23 e calculada pela Equação 2.83.

Figura 23 – Mecanismo RT com distância de quebra ativa



Fonte: adaptado de (Braga et al., 2017) *apud* Reitz et. al (1987)

$$L_b = C_b \sqrt{\frac{\rho_f \sigma h \cos \theta}{\rho_g^2 U^2}} \quad (2.83)$$

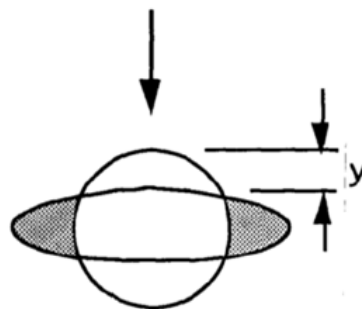
C_b é uma constante para se ajustar a distância de quebra do modelo RT. (Huang, 2014) escolheu para esse coeficiente o valor de 10,4.

Na maioria dos estudos de *break-up*, o coeficiente $B_0 = 0,61$. Entretanto B_1 é escolhido entre 10 e 40 (Huang, 2014) e $C_\tau = 1$. No trabalho realizado por (Braga et al., 2017), foi feito o levantamento dos valores das constantes utilizadas em outros trabalhos científicos anteriores e dentre eles as constantes escolhidas foram $C_{RT} = 0,5$, $B_1 = 7$ e $C_b = 0$.

2.1.4.2 Forças aerodinâmicas

No trabalho de (Liu; Mather; Reitz, 1993) os modelos de *spray* foram desenvolvidos com base no estudo experimental das trajetórias de uma única gota em um fluxo de gás de alta velocidade relativa. Os cálculos foram feitos usando uma versão modificada do código KIVA-2, ajustando o coeficiente de arrasto da gota e a constante do modelo do tempo de quebra da gota para reproduzir aproximadamente os valores do experimento. Assim, foi proposto um novo submodelo de arrasto de queda, o modelo do *Drag* dinâmico, no qual o coeficiente de arrasto de queda muda dinamicamente com as condições de fluxo, possibilitando avaliar os efeitos de distorção de queda e oscilação devido ao movimento relativo da gota em queda e o gás. O valor do coeficiente de arrasto varia entre dois limites, um considerando a gota como uma esfera perfeita (sem distorção) e outro considerando a gota com o formato de um disco (distorção máxima), como mostrado na Figura 24. Esse modelo foi aplicado em *spray* de diesel, e mostrou que a penetração do *spray* não é muito afetada pelo valor empregado para o coeficiente de arrasto da gota. No entanto, a distribuição dos tamanhos das gotas nos *sprays* é influenciada pelo arrasto, pois as mudanças no arrasto das gotas provocam mudanças na velocidade relativa da gota e o gás, que também provoca mudanças no tamanho das gotas do *spray* através dos processos de *break-up* e coalescência. O efeito resultante na penetração do *spray* é pequeno em todas as condições testadas. Estes resultados mostram que as medidas de penetração no *spray* não são suficientes para testar e produzir modelos de *spray*.

Figura 24 – O modelo de *Drag* Dinâmico para a distorção da gota devido ao escoamento



Fonte: adaptado de (Liu; Mather; Reitz, 1993)

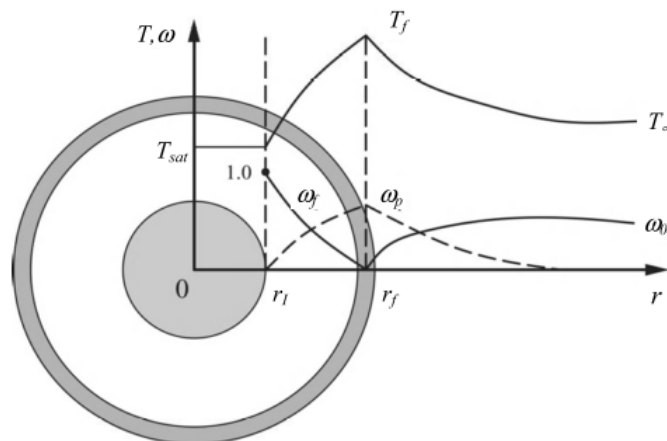
2.1.4.3 Evaporação

A evaporação de gotículas de um único componente foi amplamente estudada por vários pesquisadores ((Brereton, 2013), (Elwardany; Sazhin; Farooq, 2013)). Embora estes estudos não abordem diretamente as complexidades da difusão de massa multicomponente e da mudança de fase, eles forneceram contribuições importantes para a modelagem eficiente e precisa de evaporação de gotículas multicomponentes, tais como:

- Modelos de dinâmica de gotículas;
- Correlações do número de Nusselt e Sherwood para calor superficial e transferência de massa a partir de gotículas esféricas em movimento como funções dos números de Reynolds, Prandtl e Schmidt;
- Os efeitos do cisalhamento externo na circulação líquida na gota e sua correlação com a difusividade efetiva.

No trabalho de (Faghri, 2006), é pressuposto que para cada gota a temperatura é uniformemente igual à temperatura da superfície. Por exemplo, a fração mássica do combustível na interface do líquido com o vapor é igual a um. A Figura 25 apresenta um caso avaliado da evaporação de uma gota durante a combustão.

Figura 25 – Combustão ocorrendo próximo a uma gota de um combustível



Fonte: adaptado de (Faghri, 2006)

Em modelos de gotículas esféricas e simétricas, a modelagem da difusão de componentes de combustível dentro de uma gota a partir da solução de uma equação diferencial parcial dependente do espaço para cada componente, pode ser computacionalmente dispendiosa (Brereton, 2013).

Os modelos fisicamente representativos de evaporação de gotículas multicomponentes exigem que o transporte de cada componente significativo da mistura de combustível

seja descrito dentro da gota, na sua superfície, e ao longo da gota. A melhor abordagem para o desenvolvimento de modelos computacionalmente eficientes deve conter alterações na aproximação das Equações Diferenciais Parciais (EDP) que descrevem a difusão da massa em gotas esfericamente simétricas. É evidente que os modelos de gotas esfericamente simétricas não conseguem capturar todas as sutilezas do fluxo tridimensional de fluido dentro de gotículas. Entretanto, eles representam um ponto de partida para o desenvolvimento de modelos de gotas assimétricas ou outros modelos mais gerais. Por esse motivo, a abordagem EDP de (Brereton, 2013) *apud* Torres *et al.* é usada como um ponto de partida para desenvolver um modelo simplificado baseado na solução de Equações Diferenciais Ordinárias (EDO). Essa abordagem de EDP para a computação de evaporação de gotículas multicomponentes foi desenvolvida no trabalho de (Brereton, 2013) e o modelo final pode ser representado nas Equações (2.84) e (2.85).

$$\frac{m_{f\alpha} - m_{fc,\alpha}}{m_{fls,\alpha} - m_{fc,\alpha}} = \left(\frac{r}{r_s}\right)^{n_\alpha} \quad (2.84)$$

$$\frac{T - T_c}{T_s - T_c} = \left(\frac{r}{r_s}\right)^{n_T} \quad (2.85)$$

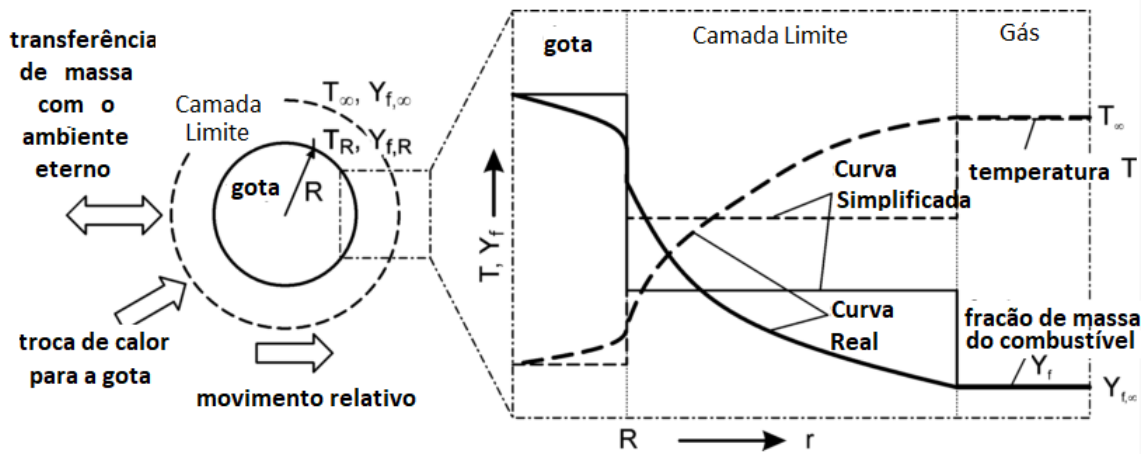
Nas Equações (2.84) e (2.85), r_s é o raio da gotícula, $m_{f\alpha}$ é fração mássica do componente α e os subscrito ls e c se referem a posição da variável, seja ela na superfície (interface entre líquido e gás) ou no núcleo da gotícula, respectivamente. n_T e n_α são fatores de temperatura e de perfil de concentração, que evoluem com o tempo de acordo com a evaporação do líquido.

De acordo com (Baumgarten, 2006), normalmente é considerado que o efeito da troca de calor por radiação deve ser desprezado, pois é irrisório em comparação com a troca de calor por convecção. Como não é possível calcular o campo de escoamento ao redor do *spray*, a modelagem da evaporação se baseia em um escoamento médio e em um coeficiente médio de troca de calor ao redor das gotas. Durante o cálculo da evaporação nas gotas, todos os outros fenômenos (*break-up*, colisão, distorção da gota, etc.) não são considerados. Além disso, a solubilidade do gás circundante na gota e o efeito da tensão superficial com a pressão de vapor também são negligenciados. Na Figura 26 se pode observar as características de uma gotícula variando com a distância radial.

2.1.4.4 Modelos de Colisão

No trabalho de (Ghadimi; Youseffard; Nowruzi, 2016), dois modelos diferentes para colisão entre gotas de um jato foram estudados. O Modelo de *O'Rourke* se baseia no cálculo da probabilidade de colisão entre duas gotas que estão no mesmo volume finito. Esse modelo é muito influenciado pela escolha da malha empregada. O segundo modelo de colisão, desenvolvido por Nordin, calcula as trajetórias dos *parcels* e identifica todos

Figura 26 – Evaporação de uma gota de um combustível



Fonte: adaptado de (Baumgarten, 2006)

os demais que os interceptam em cada intervalo de tempo. Esse processo reduz a carga computacional do modelo de colisão e a probabilidade de colisão é determinada pela Equação (2.86).

$$\left(\frac{\frac{1}{2}(d_1 + d_2)}{\max\left(\frac{1}{2}(d_1 + d_2), |X_{1,new}(t_\alpha) - X_{2,new}(t_\beta)|\right)} \right) e^{\frac{C_{space}(t_\alpha - t_\beta)}{\Delta t}} \quad (2.86)$$

Onde $|X_{1,new}(t_\alpha) - X_{2,new}(t_\beta)|$ é a menor distância entre dois *parcels* durante um passo de tempo, e C_{time} e C_{space} são constantes do modelo que controla a taxa de colisão em um dado intervalo de tempo e espaço, respectivamente.

O modelo de trajetória de colisão apresentou resultados mais exatos especialmente no final do processo de injeção, durante o intervalo de tempo estudado. No entanto, para efeito da penetração de jato as diferenças entre os dois modelos é desprezível.

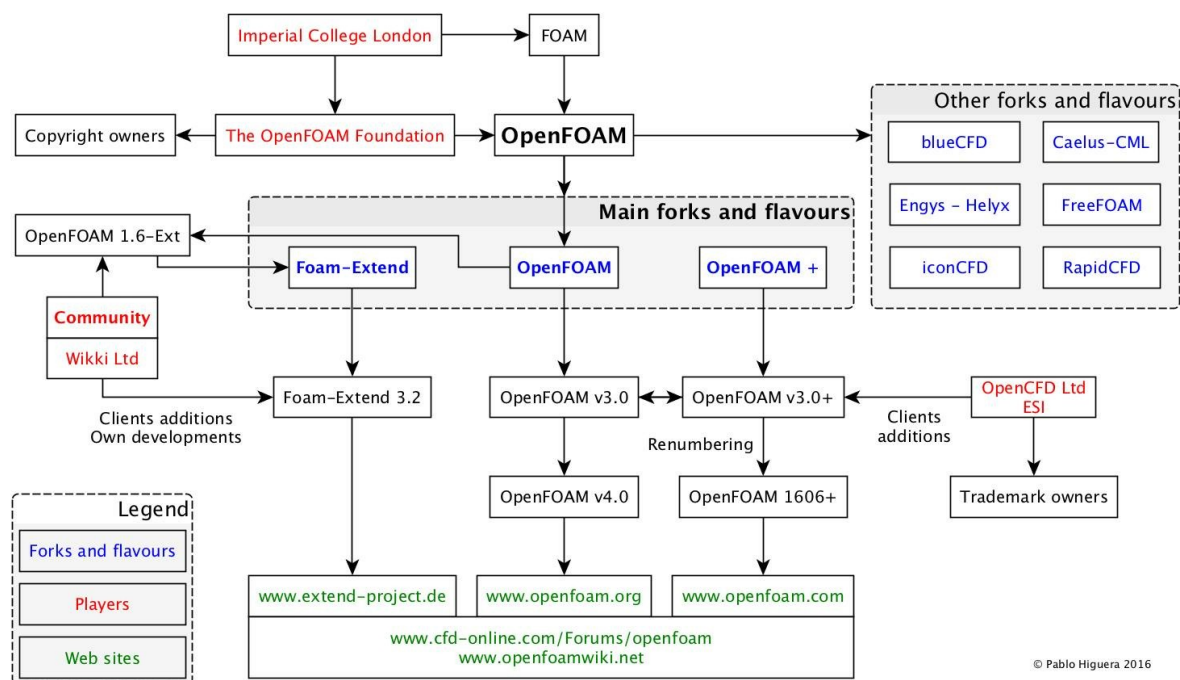
2.1.5 O software OpenFOAM

Embora vários códigos CFD comerciais bem estabelecidos no mercado (Star-CD, FIRE, FORTE, Fluent, KIVA, etc.) estejam disponíveis, as empresas tem maior interesse em adotar *softwares* de menor custo. Por esse motivo, o OpenFOAM (do inglês *Open Field Operation and Manipulation*), que é um *software* CFD gratuito, com código aberto e disponível em (ESI GROUP, 2010) e (Weller, 2010), atrai cada vez mais atenção de organizações comerciais e acadêmicas desde o seu lançamento em 2004 (Jasak; Weller; Nordin, 2004). Em particular, os pesquisadores que trabalham no campo dos motores de combustão interna tem mostrado interesse crescente em usar este código nos últimos anos, como mostram os trabalhos de (Jasak; Weller; Nordin, 2004) e (Lucchini; Errico; Nordin,

2005). Entretanto, embora o número de problemas relevantes para motores de pistão que são estudados com o OpenFOAM continue a crescer, ainda existem muitos problemas que ainda não foram abordados com este código. Consequentemente, serão necessários mais estudos para avaliar adequadamente a sua utilidade na indústria automotiva, principalmente pelos custos de validação do método numérico. No que diz respeito ao interesse acadêmico, é um dos melhores *software* para uso, além de ser de código aberto e gratuito.

O OpenFOAM foi criado por Henry Weller em 1989 com o nome de “FOAM” e depois foi lançado como um *software* aberto com o nome de “OpenFOAM” por Henry Weller, Chris Greenshields e Mattijs Janssens em dezembro de 2004. Desde então, OpenFOAM continua a ser desenvolvido e mantido por diversas pessoas, com novas versões sendo lançadas anualmente. Na Figura 27 é apresentado um diagrama mostrando como as versões do OpenFOAM se desenvolveram ao longo dos anos até o presente, em diversas vertentes. No presente trabalho foi escolhida a versão OpenFOAM v4.0 (Weller, 2010).

Figura 27 – Infográfico sobre as vertentes das versões do OpenFOAM ao longo dos anos



Fonte: adaptado de Pablo Higuera 2016

A Dinâmica dos Fluidos Computacional, CFD, desenvolveu-se até o ponto em que o campo de escoamento tridimensional completo sobre o veículo e através dos motores pode ser computado com relativa rapidez, precisão e confiabilidade, dependendo dos recursos computacionais disponíveis e do nível de precisão dos resultados. Para atingir os requisitos da atual legislação, a indústria deve investigar uma série de fatores que podem potencialmente reduzir as emissões do motor, incluindo combustíveis, processo de

combustão, cinética química, fluxo da mistura no cilindro do motor, formação de mistura de combustível-ar, *spray*, geometrias do motor, entre outros fatores. Atualmente, simulações computacionais são adotadas como uma ferramenta de análise chave na pesquisa de motores para estabelecer correlação com estudos experimentais e fornecer novas informações para os engenheiros e projetistas. Uma vantagem significativa de usar CFD é a flexibilidade de configurações de simulação e a redução de tempo e custo em comparação com experimentos. Os principais códigos comerciais CFD disponíveis no mercado incluem Ansys CFX, Ansys Fluent, AVL Fire, CD-adapco Star-CD e Star-CCM+. Por outro lado, é possível usar um código aberto como o OpenFOAM, desde que o pesquisador esteja familiarizado com a ferramenta.

Em (Schor et al., 2017) dois *software* foram testados, OpenFOAM e StarCCM+ em um modelo computacional para investigar os processos de atomização de *spray* de combustível do tipo de cone oco de um injetor do tipo *swirl* de alta pressão para motores de injeção direta de etanol. O objetivo desse estudo foi realizar uma comparação confiável entre o software comercial e o software de código aberto. As características do *spray* foram calculadas, medidas e comparadas, como a estrutura do *spray* principal, a penetração da ponta e os fenômenos de *break-up*, alcançando bons níveis de concordância.

2.1.6 Estado da Arte

Nesta seção é feito um apanhado dos trabalhos relevantes feitos nos últimos anos sobre a mistura do ar-combustível, injeção de combustíveis, controle de emissões e otimização de motores utilizando a otimização da estratégia de injeção. Alguns trabalhos mais antigos também são descritos, pois são estudos ainda relevantes para o presente trabalho.

(Schmidt et al., 1999) desenvolveram um modelo de *sprays* do tipo *pressure-swirl*, onde não são necessárias muitas informações sobre a geometria interna do injetor, mas sim informações das características externas do *spray*. Nesse modelo, primeiramente, é feita a correlação da velocidade de saída do injetor para se definir a espessura da lâmina de líquido. Em seguida, esse filme de líquido é modelado enquanto se torna cada vez mais fino, até o *break-up*, formando gotas. Uma análise linear de instabilidade é utilizada nesse *break-up* do filme de líquido viscoso como condição de contorno. O ângulo de *spray* é estimado a partir de imagens de um experimento do *spray*. Esse modelo citado anteriormente, é o modelo LISA.

Em seu trabalho, (Wirth et al., 2000) abordam os conceitos de motores com alto potencial de economia de combustível com o uso de injeção direta. Os autores concluem que combinação da tecnologia DI com outras, como o turbo para o *downsizing* e a taxa de compressão variável, eleva consideravelmente a eficiência de motores. Utilizando a flexibilidade da injeção direta de gasolina algumas deficiências dessas tecnologias podem

ser eliminadas.

(Wang et al., 2005) estudaram as características dos *sprays* do tipo *high-pressure-swirl* com a injeção de metanol e etanol, de forma experimental e numericamente. Os resultados experimentais mostraram que esses combustíveis seguem a mesma tendência dos *sprays* de gasolina. Com baixas contra pressões de injeção o comportamento do *spray* apresenta um cone oco com uma grande abertura e o *pre-spray*. Os ângulos do cone do *spray* de etanol e de gasolina têm o mesmo valor, enquanto o do *spray* de metanol tem um maior ângulo. A simulação mostrou que metanol e etanol tem o SMD ligeiramente maior que o da gasolina. Os resultados obtidos nesse trabalho demonstraram que os cálculos numéricos reproduziram com sucesso as características de um *sprays* do tipo *high-pressure-swirl* para etanol e para metanol.

(Senecal et al., 2007) desenvolveram um novo código para superar as dificuldades de se criar uma malha dinâmica e móvel para discretizar corretamente o domínio de um motor de combustão interna. Nesse código é empregada uma técnica cartesiana de *cut-cell* que elimina a necessidade da malha computacional coincidir com o domínio de interesse e também foi incluído o *Adaptive Grid Embedding* - AGE, para possibilitar o refinamento da malha de acordo com variáveis definidas pelo usuário, como o gradiente de temperatura, a velocidade e a pressão. O código utiliza os modelos do *spray* KH-RT modificado com a instabilidade de Rayleigh-Taylor, dinâmica do *spray*, LISA, entre outros. Esse trabalho apresenta a validação dessa metodologia em vários casos de *spray* de diesel, indicando que essa combinação da malha adaptativa com os modelos torna esse código uma ótima ferramenta para se simular motores de combustão interna.

Em seu trabalho (Shim; Choi; Kim, 2008) apresentam um modelo híbrido de quebra para os *sprays* de cone oco em câmaras de pressão atmosférica. Esse modelo é composto pelo modelo LISA como *break-up* primário, e o modelo TAB modificado, chamado de *Aerodynamically Progressed Taylor Analogy Breakup*, APTAB, como *break-up* secundário. Para o efeito da deformação da gota o modelo de ATAB é empregado. A distribuição de tamanho de gotas utilizada nesse trabalho é a Rosin-Rammler. Essas simulações foram comparadas com dados experimentais, obtidos através das técnicas de *Laser Induced Exciplex Fluorescence*, LIEF, e *Phase Doppler Anemometry*, PDA. O modelo *break-up* híbrido sugerido mostrou melhor capacidade de previsão em relação ao modelo anterior (modelo LISA + TAB). A partir dos resultados calculados, o efeito da pressão ambiente no SMD e na velocidade da gota foram discutidos quantitativamente.

O foco do trabalho de (Park et al., 2009) foi a investigação das características do *spray* de gasolina (E0), etanol (E100) e uma mistura desses dois combustíveis (E85) em um motor de combustão interna do tipo DI. O processo de desenvolvimento e o tempo de ocorrência dos vórtices nos combustíveis de teste são muito semelhantes. Além disso, os resultados numéricos descrevem com precisão o padrão e a forma de desenvolvimento

de *spray* observado experimentalmente, a posição inicial do vórtice e o *break-up* do *spray*. O aumento da pressão de injeção induziu a ocorrência de vórtex no *spray* à jusante do escoamento e uma mistura uniforme entre as gotas de *spray* e o ar ambiente. As penetrações da ponta do *spray* dos combustíveis de teste determinadas são semelhantes, enquanto a largura do *spray* e o ângulo do cone determinados para o E100 são ligeiramente maiores que os dos outros combustíveis. Em termos de desempenho de atomização, o combustível E100 produziu o maior tamanho de gotícula, dentre os combustíveis testados, devido a sua alta viscosidade cinemática e tensão superficial.

Em seu trabalho (Hindi; Pimenta, 2011) investigaram numericamente a influência de dois tipos de injetores de cone oco, o de abertura interna da agulha e o de abertura externa da agulha. Esses dois tipos de injetores já foram apresentados na Figura 6. Mantendo fixo o tempo de ignição foi variado o tempo final da injeção, tentando sempre manter IMEP bruto igual. Os resultados mostraram que o injetor de abertura externa produz uma melhor mistura de ar e combustível, até mesmo com o final de injeção atrasado, o que provoca uma maior eficiência da combustão e uma menor quantidade de hidrocarbonetos não queimados, além de CO e emissões de particulados, enquanto aumentam as emissões de NO_x . Também foi observado que o 10-90% do MFB é maior para o injetor de abertura externa.

O trabalho de (Kah; V. Mittal; Pitsch, 2012) contribui para a modelagem de um motor de combustão interna, integrando na simulação o modelo de turbulência LES com um modelo de *spray*. A parametrização do modelo LES foi validada preliminarmente com a injeção de etanol em uma câmara atmosférica contendo nitrogênio. Os primeiros testes de validação no regime HCCI demonstraram a robustez do *solver*. Em particular, o campo da fração de mistura entre o combustível e o gás circundante conduziu a auto-ignição. Esses resultados promissores abrem caminho para cálculos em uma malha refinada, com a qual as maiores estruturas de turbulência podem ser resolvidas.

(Guzzo, 2012) em seu trabalho, estudou o estabelecimento de estratégias de análises de importantes parâmetros associados aos *sprays* produzidos por um injetor de injeção direta utilizando água, gasolina e etanol como fluidos de teste. A base na aquisição de dados para este estudo consistiu nas imagens dos processos de atomização e nos campos de velocidades obtidos pela técnica de Velocimetria por Imagens de Partículas. Uma estratégia matemática foi estabelecida para identificar as fronteiras dos *sprays* através de uma função e um sistema de referência apropriado. Os resultados mostraram taxas de penetrações coerentes com os campos de velocidades obtidos por PIV e boa reprodutibilidade das estratégias metodológicas empregadas, sugerindo assim uma efetiva validade das mesmas.

O trabalho de (Mayer, 2012) apresenta uma análise numérica 3D do *spray* gerado por um injetor do tipo *pressure swirl atomizer* injetando etanol em uma câmara atmosférica. As simulações foram realizadas utilizando o *software* STAR-CCM+9. Para o *break-up* primário

do spray foi utilizado o modelo LISA e para o *break-up* secundário foram analisados dois modelos distintos, o modelo de KHRT (Kelvin-Helmholtz Rayleigh-Taylor) e o modelo de Reitz-Diwakar. Ambos foram avaliados com e sem o modelo de colisão entre as partículas. A penetração de líquido do combustível foi validada através da curva de penetração média e seus limites superior e inferior. Todos os modelos apresentaram um comportamento semelhante à curva experimental, entretanto os modelos utilizados não descrevem o comportamento do pré-*spray*. Todos os modelos apresentaram os perfis das bordas com um comportamento semelhante ao experimental. As imagens do *spray* simulado para a distribuição de velocidade das partículas foram comparadas com as imagens experimentais. Para os quatro modelos analisados observou-se a presença do vórtice na região frontal do *spray*.

Em (Senecal; Pomraning; Richards, 2013) uma metodologia de modelagem de *spray*, recentemente aplicada às simulações RANS, é apresentada para os cálculos com o LES. Nesse trabalho são descritas as principais características da metodologia, como Refinamento de Malha Adaptativa (*Adaptive Mesh Refinement* - AMR) e melhor distribuição da fase líquida. A capacidade dessa abordagem de usar tamanhos de volumes muito menores do que o diâmetro do bico injetor é demonstrada. A convergência da malha com os parâmetros-chave é verificada para casos com e sem a evaporação do *spray*, utilizando volumes de até 1/32 mm. Para obtenção de quantidades globais, como a penetração do *spray*, a comparação de uma única simulação de LES com dados experimentais é razoável. No entanto, para obtenção de quantidades locais é necessária a determinação da média de muitas simulações de injeções. Ao final também são feitas recomendações de configurações de malha para otimizar a precisão e o tempo de execução para as simulações de *spray* com o LES.

(Huang; Yasari; Lipatnikov, 2014) desenvolveram alguns modelos utilizando o OpenFOAM para uso na simulação de combustão turbulenta estratificada em motores DI SI. Modelos avançados de fenômenos relevantes para chamas turbulentas, parcialmente pré-misturadas, foram implementados no código, e empregado em simulações RANS 3D transientes de queima turbulenta estratificada em um motor DI SI. Inicialmente, foi implementado o modelo *Flame Speed Closure*, FSC, da combustão turbulenta da mistura. Em seguida, um modelo para avaliar a densidade média das chamas turbulentas que já estava disponível na biblioteca do OpenFOAM foi melhorado, e introduzido um mecanismo químico semi-detalhado para descrever a influência da razão de equivalência, pressão e temperatura do gás não queimado na taxa de queima e temperatura da chama. A temperatura da chama e a velocidade da chama laminar foram calculadas, aproximadas e implementadas na biblioteca OpenFOAM. Para determinar a influência das flutuações na composição da mistura sobre as variáveis médias, foi implementada uma média chamada de Favre beta-PDF para a fração da mistura. A implementação da equação de equilíbrio para a variação da fração da mistura foi melhorada acrescentando o termo da fonte de

evaporação. Finalmente, as taxas de queima média calculadas com e sem os modelos acima mencionados foram comparadas para avaliar a importância dos efeitos estudados.

(Rocha, 2015) estudou em seu trabalho o fenômeno da atomização de um *spray* de etanol produzido por um eletro injetor através de uma simulação numérica. Nesse trabalho foi utilizado o *software* comercial STAR-CCM+, pois, segundo o autor, ele apresenta modelos adequados para representação do *spray*. O modelo LISA (*Linearized instability sheet atomization*) foi escolhido para representação do *break-up* primário e o KHRT (Kelvin-Helmholtz/ Rayleigh-Taylor) para o *break-up* secundário, sendo que nas simulações realizadas foi analisada a influência do modelo de colisão de partículas. O modelo foi validado com dados experimentais e foi possível concluir que o modelo sem colisão se aproxima melhor aos dados experimentais quando se comparam a penetração e bordas do *spray*.

(Park et al., 2015) estudaram estratégia de múltiplas injeções para reduzir o ruído de combustão e as emissões não queimadas nas condições de combustão a baixas temperaturas (*Low Temperature Combustion*, LTC). Um modelo de mistura de combustível híbrido foi desenvolvido e validado, e então usado para melhorar as previsões em LTC. A estratégia de injeção tripla foi inicialmente avaliada para encontrar a função de cada pulso e, em seguida, otimizada. A relação entre o primeiro e segundo pulsos de combustível foi encontrada para determinar o atraso da ignição. A massa crescente do primeiro pulso reduziu as emissões não queimadas e um aumento da quantidade de combustível no terceiro impulso reduziu o ruído. Os autores concluíram que a distribuição de pulsos de combustível pode ser usada como fator de controle para emissões e ruído.

No trabalho de (Battistoni; Xue; Som, 2016) é investigado um *spray* de diesel utilizando a abordagem Euleriana e o modelo de turbulência LES. Dois problemas são estudados com um alto nível de resolução espacial e temporal. O primeiro é a simulação do final da injeção (*End Of Injection*, EOI) na qual a injeção de gás, a cavitação e a formação de recirculação são resolvidos pelo modelo. O segundo caso é uma simulação de início da injeção (*Start Of Injection*, SOI) que visa analisar o efeito do gás residual preso dentro da câmara de *swirl* do injetor na penetração do *spray* e na taxa de injeção de combustível. Os resultados da simulação são comparados com os experimentos realizados no Argonne National Laboratory (ANL) usando o *synchrotron X-ray*. Uma análise de sensibilidade de malha foi conduzida para avaliar a qualidade da abordagem LES, avaliando a energia cinética turbulenta e comparando os resultados com um índice de resolução de escala de comprimento. O modelo de turbulência LES nos dois casos, EOI e SOI, foi aplicado em um injetor de diesel de um único furo no bico injetor, fornecendo informações sobre os processos e detalhes sobre o fluxo interno e externo e vinculando os fenômenos do final de um evento de injeção com os do início de uma nova injeção. No caso do EOI, o modelo consegue prever a formação dos ligamentos e da mistura do gás com o líquido injetado

conforme observado experimentalmente, e a quantidade de gás residual na câmara de *swirl* do bocal do bico injetor também coincide com os dados experimentais disponíveis. A dinâmica do processo é descrita em detalhes e a simulação fornece informações sobre a física no instante do EOI. Da mesma forma, a simulação do SOI mostra como o gás é injetado primeiramente e o início da injeção do combustível líquido com um atraso. A simulação começa a partir de uma abertura bem pequena da agulha e é capaz de prever a Taxa de Injeção (*Rate Of Injection*, ROI) real e a penetração do jato, com base somente no movimento da predefinido da agulha.

O trabalho de (Ribeiro et al., 2016) apresenta uma compilação de estudos numéricos desenvolvidos pelo seu grupo e colaboradores nos anos de 2014 e 2015, incluindo as simulações utilizando o modelo LES no motor de pesquisa com acesso óptico de Duisburg e as simulações de *spray* de gasolina de um injetor do tipo multifuro, também chamado de "*Spray G*", fornecido pelo grupo *Engine Combustion Network*, ECN. Inicialmente, foi investigado o efeito do volume do *crevice* do motor sobre o desempenho da combustão no motor do tipo PFI SI, tendo o motor de Duisburg como parâmetro. Em seguida, as simulações de "*Spray G*" foram realizadas usando as metodologias RANS e então se utilizou o modelo LES. Em todos os casos, os resultados foram validados com dados experimentais.

(Amorim, 2016) apresenta em seu trabalho uma metodologia que permite estudar e prever o comportamento de parâmetros importantes da injeção de combustível em um motor quando o mesmo se encontra em fase de projeto, o que pode melhorar a eficiência do produto final. A metodologia consiste em duas etapas, sendo que na primeira apenas o *spray* de um injetor, instalado em uma câmara à pressão atmosférica, foi caracterizado numericamente e os resultados foram validados com dados experimentais. Na segunda etapa, os parâmetros e condições utilizados anteriormente e validados para o *spray* do injetor foram inseridos como dados de entrada para uma simulação completa do motor objetivo, com análise de diferentes condições de injeção. A partir dos resultados obtidos, para uma determinada condição de injeção do motor, foi possível ajustar parâmetros do projeto e atualizar condições de contorno que levem a novas condições de injeção que acarretem maiores eficiências de combustão.

O trabalho de (Júnior, 2017) descreve experimentos com o objetivo de analisar a influência da pressão de injeção, contrapressão ambiente e o tipo de fluido de teste nos parâmetros de atomização (macroscópicos e microscópicos) do *spray* de injeção direta *high-pressure swirl*, empregando como fluidos de teste água, etanol anidro (EA), etanol combustível (E100), gasolina (E0), gasolina (E22), Exxsol D40 e Exxsol D60. Os resultados mostraram um comportamento semelhante entre os combustíveis e o Exxsol D40, para as características macroscópicas e as microscópicas. O estudo também mostrou que a qualidade da atomização melhora com o aumento da pressão de injeção, ou seja, produzindo gotas com menores diâmetros e maiores velocidades.

(Braga et al., 2017) empregaram um modelo de *breal-up* que é a combinação do Kelvin-Helmholtz e Rayleigh-Taylor, KH-RT, em uma simulação de *spray* de etanol com um injetor multifuro. Os resultados numéricos do *spray* foram comparados com dados de experimentos obtidos em uma câmara controlada. Uma análise da sensibilidade da penetração do *spray*, assim como sua forma qualitativa, foi feita em função das restrições do modelo. Foram determinadas as seguintes constantes ideais para simular a injeção de etanol com esse modelo: $C_3 = 0,5$, $B_1 = 7$ e $C_b = 0$. Na segunda parte desse trabalho foi feita uma simulação completa do motor de pesquisa, com injeção direta de etanol, para caracterizar o motor a 2000 RPM a 8 bar de BMEP (*Break Mean Effective Pressure*). Os resultados finais foram comparados com dados experimentais e as curvas de pressão, taxa de liberação de calor e evaporação do combustível foram analisados.

(Zhang et al., 2017) realizaram um estudo numérico sobre o escoamento dentro do cilindro de um motor turbo 1.0, para otimizar o sistema de combustão de um motor operando a 5500 RPM. Nesse trabalho uma injeção tripla foi utilizada para melhorar a estabilidade da combustão e para esquentar o catalisador, e para isso a injeção de um *spray* de 6 furos foi otimizada. Os resultados mostraram que o momento de início da terceira injeção influencia diretamente a chama difusiva e a formação de particulados. Nesse trabalho ainda foram investigadas condições de operação do motor a 2000 RPM a 3 bar e 1500 RPM a WOT. Após o estudo numérico as estratégias de injeção otimizadas foram utilizadas no motor em veículo resultando em 18% de melhora no consumo de combustível no ciclo, *New European Driving Cycle*, NEDC quando comparado a um motor aspirado de 1.6 litros. Com essa configuração também foi obtida uma melhora de 25% do consumo de combustível quando o veículo operou dentro de uma cidade.

3 Metodologia

Neste capítulo é apresentada a metodologia proposta e utilizada na realização deste trabalho, desde a descrição do domínio virtual até os procedimentos necessários para a análise em CFD utilizando o OpenFOAM. No Anexo A estão descritas as técnicas experimentais que foram utilizadas para validação dos dados numéricos.

3.1 Simulação Numérica do *Spray* de Cone Oco

Nas seções 3.1.1.1 a 3.1.1.3 são discutidos os modelos utilizados no OpenFOAM e as particularidades da implementação das teorias em comparação ao modelo teórico apresentado na seção 2.1.4 e finalmente na seção 3.1.4 serão apresentados os resultados da sensibilidade da malha e do passo de tempo empregados nas simulações.

3.1.1 Modelagem do *Spray* utilizando o OpenFOAM

3.1.1.1 O começo da Injeção

O modo mais simples de se representar a atomização primária é utilizar uma função de *Rosin-Rammler* PDF. O raio de cada *parcel*, r , injetado no domínio numérico é calculado pela Equação 3.1, onde o fator q é uma constante de ajuste e r_m o raio médio das gotas.

$$f(r) = \frac{qr^{q-1}}{r_m^q} \exp \left[- \left(\frac{r}{r_m} \right)^q \right] \quad (3.1)$$

No OpenFOAM essa equação é truncada para um valor específico quando $r_{min} < r < r_{max}$, onde r_{min} é o raio mínimo e r_{max} o raio máximo, normalmente controlado pelo tamanho do bico injetor (Huang, 2014). A Equação 3.1 então é implementada na forma da Equação 3.2.

$$C(r_{min}, r_{max}) = \left\{ \exp \left[- \left(\frac{r_{min}}{r_m} \right)^q \right] - \exp \left[- \left(\frac{r_{max}}{r_m} \right)^q \right] \right\}^{-1} \quad (3.2)$$

Para normalizar essa equação é empregada a Equação 3.3

$$\int_{r_{min}}^{r_{max}} C \frac{qr^{q-1}}{r_m^q} \exp \left[- \left(\frac{r}{r_m} \right)^q \right] dr = 1 \quad (3.3)$$

Esta função é utilizada juntamente com a Equação 3.4, onde \dot{m} pode ser um perfil da vazão mássica do injetor em cada interpolado para cada passo de tempo, ou calculado pelas Equações 3.5 e 3.6.

$$w = \frac{\dot{m}}{C_d \rho_f A_i} \quad (3.4)$$

$$p_{inj} = p_{ar} + \frac{\rho_f w^2}{2} \quad (3.5)$$

$$\int_0^\infty \dot{m}(t) dt \quad (3.6)$$

Em que C_d é o coeficiente de descarga do bico injetor, A_i a área efetiva de abertura do injetor, ρ_f a densidade do combustível, p_a a pressão na câmara de injeção.

3.1.1.2 O modelo LISA

O modelo desenvolvido por (Schmidt et al., 1999) e por (Senecal et al., 1999) considera como a força primária na atomização, o crescimento das perturbações em uma lâmina de líquido devido à instabilidade de Kelvin-Helmholtz.

Para poder representar o efeito da contrapressão foi proposto por (Lucchini; Errico; Nordin, 2005) um fator de correção para o diâmetro de novas gotas. Então a Equação 2.61 foi modificada gerando a Equação 3.7, para calcular o novo diâmetro de gota do *break-up*, d_D .

$$d_D = d_{LISA} \left(\frac{p_{inj}}{p_a} \right)^{expLISA} \quad (3.7)$$

Nessa equação, foi sugerido o valor do coeficiente $expLISA = 0.135$, determinado experimentalmente.

No código OpenFOAM, é empregado para a atomização o valor do diâmetro d_D como o diâmetro médio para uma distribuição *Rosin-Rammler*.

3.1.1.3 O modelo de *break-up* secundário

Os modelos de *break-up* secundário simulam a formação das gotas após a atomização, à jusante do *spray*. Esse processo ocorre basicamente devido à interação das gotas com o gás circundante, através das forças aerodinâmicas atuando na sua superfície.

Para o modelo de *Reitz-Diwakar* no OpenFOAM a Equação 2.65 é resolvida utilizando um esquema implícito de acordo com a Equação 3.8 (Huang, 2014).

$$r = \frac{r^0 + r_{KH} \frac{\Delta t}{\tau_{RD}}}{1 + \frac{\Delta t}{\tau_{RD}}} \quad (3.8)$$

Onde, r^0 é o raio da gota no passo de tempo anterior $\tau_{RD}(t - \Delta t)$, calculado pela Equação 2.66 e r_{KH} é calculado pela Equação 2.74.

No modelo de *Reitz-KHRT* implementado no OpenFOAM, são necessárias as constantes de ajuste B_1 , utilizado na Equação 2.73, C_τ , utilizado na Equação 2.81, C_{RT} , utilizado na Equação 2.82 e C_b , utilizado na Equação 2.83.

Além disso, seguindo a proposta de (Su et al., 1996) é implementado no OpenFOAM que, o Coeficiente de Arraste, C_D da Equação 2.80, que é calculado pela Equação 3.9, onde B_d é uma constante, cujo valor é 2,632.

$$C_D = C_{D,esfera}(1 + B_dy) \quad (3.9)$$

Para determinar y é utilizado o modelo TAB para distorção de gota.

O modelo de (Liu; Mather; Reitz, 1993) é o modelo de distorção de gota utilizado no OpenFOAM. O movimento de uma gota esférica caracterizado por uma velocidade média W é calculado pela Equação 3.10

$$\rho_1 V \frac{d^2 \bar{X}}{dt^2} = C_d A_f \rho_2 W^2 / 2 \quad (3.10)$$

3.1.2 Parâmetros Numéricos

Inicialmente foi ajustada a taxa de injeção de combustível e, para isso, foi feito um teste de injeção em laboratório. Na Tabela 4 estão relacionados os resultados experimentais da vazão do injetor para várias pressões de injeção.

Tabela 4 – Vazão do Injetor

Pressão de Injeção	Vazão [g/s]
30	0.20
50	0.26
70	0.30
90	0.33
100	0.35
110	0.36
120	0.37

Figura 28 – Taxa de Injeção de Combustível

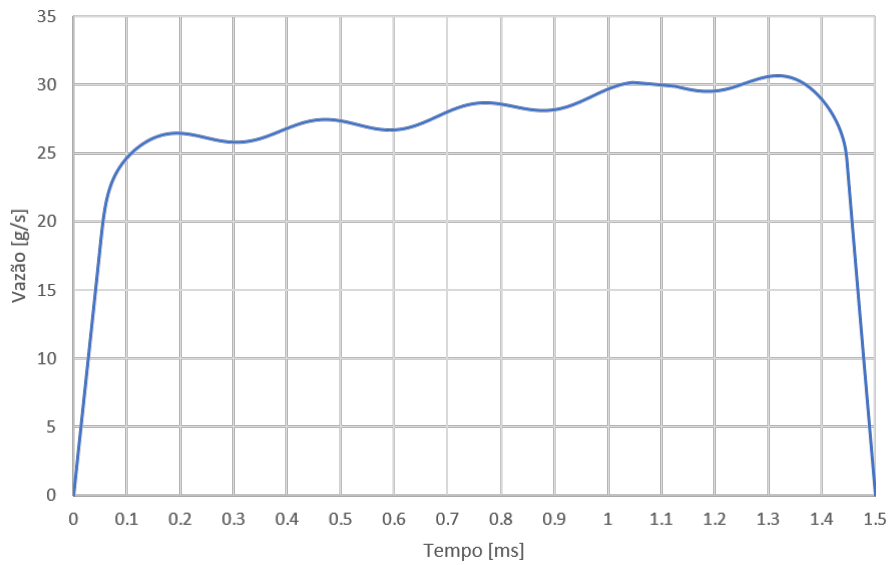
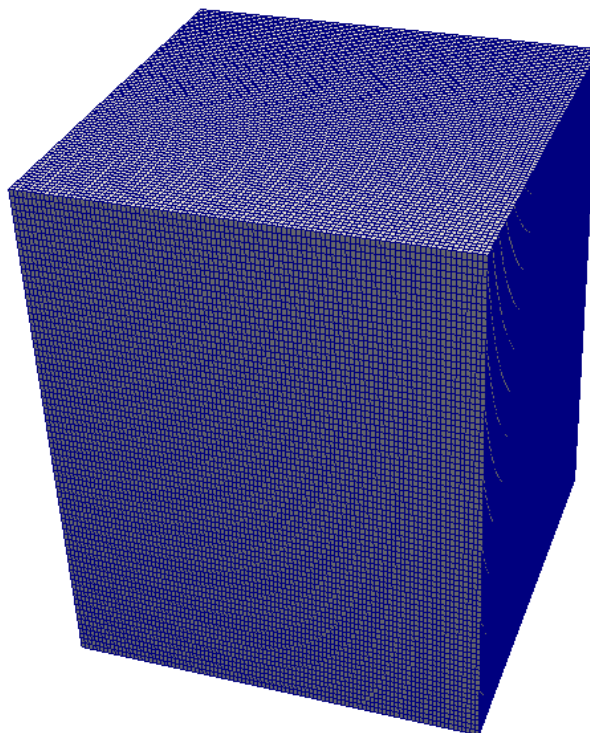


Tabela 5 – Condições Iniciais e de Contorno Experimentais para Simulação Numérica

Parâmetro	Símbolo	Unidade	Câmara Atmosférica	Câmara com contrapressão
Pressão ambiente	P_a	bar	1,0	5,0
Pressão de injeção	P_{inj}	bar		100
Temperatura Ambiente	T_{amb}	°C		25
Tempo de injeção	T_i	ms		1,5
Diâmetro do furo do bico injetor	D_{inj}	mm		0,5628
Combustível	[NA]	[NA]	Etanol e Exxsol D60	
Coefficiente de descarga (Bico injetor)	C_d	[NA]		0,8

Na primeira etapa da análise numérica foi definido o domínio numérico transiente como um cubo de 100mm de aresta, apresentado na Figura 29, e avaliada a independência do número de *parcels* que representa a nuvem de gotas de um *spray*. Para as condições de contorno se estipulou que todas as fronteiras do cubo se comportam como uma parede física com temperatura constante igual a 25° . Em seguida se avaliou o tamanho de cada elemento de malha, para garantir a independência desse parâmetro. Finalmente foi avaliado o número de *Courant*, pois o passo de tempo adaptativo utilizado nas simulações varia para manter um número máximo de *Courant*, calculado pela equação 2.47.

Figura 29 – Domínio utilizado na simulação



3.1.3 Análise de *parcel* por segundo

Com o tamanho de elemento fixo em $1,0\text{mm}$ e o número de *Courant* máximo 0,1 foram avaliados 4 valores diferentes de número de *parcels* por segundo, apresentados na Tabela 6.

Tabela 6 – Independência de Parcel

Referência nos gráficos	Número de <i>Parcels</i> Por Segundo
Parcels 1	40.000.000
Parcels 2	80.000.000
Parcels 3	160.000.000
Parcels 4	240.000.000

Como pode ser observado na Figura 30, que mostra a curva de penetração em função do tempo de injeção, a penetração de 99% de massa não varia com o maior número de *parcels* no sistema.

Também foi determinado o tamanho médio das gotas em um plano a 8 mm do bico injetor. Este valor foi empregado no experimento de (Júnior, 2017). Na Figura 31 é apresentado o diâmetro médio de Sauter, SMD, calculado para diversos passos de tempo e o seu desvio padrão e desvio padrão percentual. Esses resultados estão apresentados na Tabela 7.

Figura 30 – Curva de Penetração versus o Tempo de Injeção

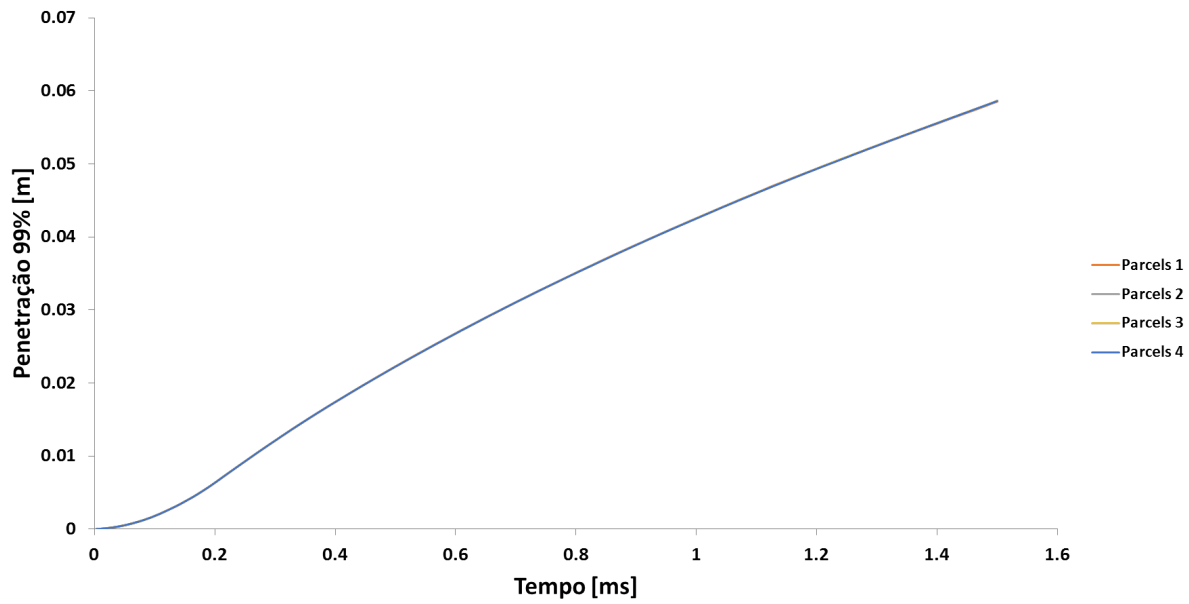
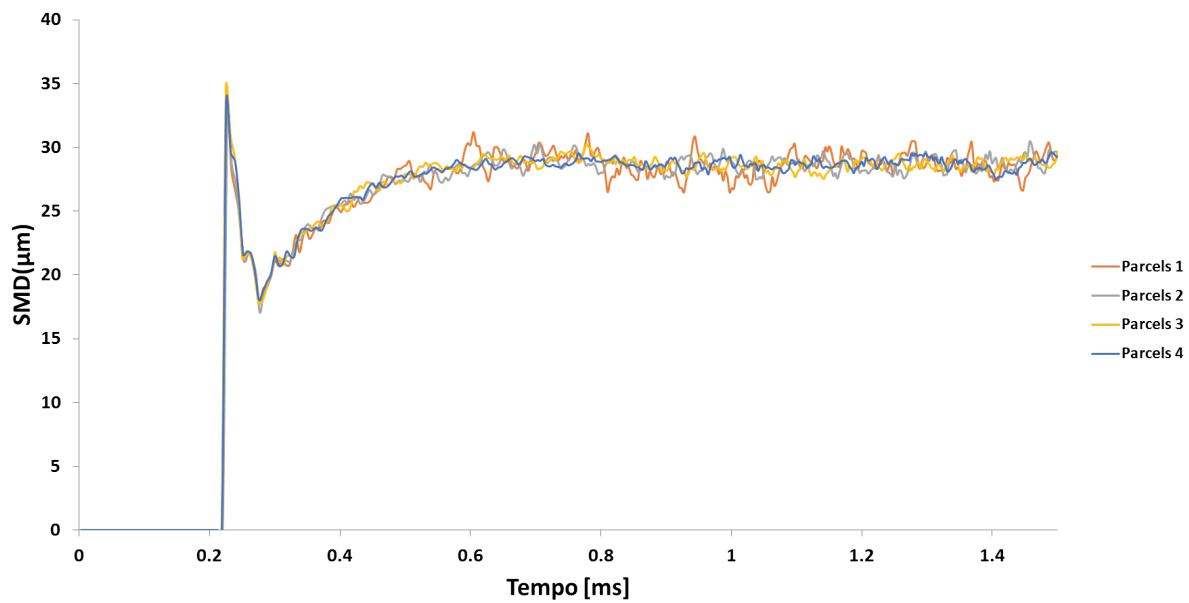


Figura 31 – Curva de SMD versus o Tempo de Injeção



Com base nos resultados obtidos foi escolhido um número de 160.000.000 *parcels* para a simulação, pois mesmo obtendo valores de penetração e diâmetro médio semelhantes, a variação desse diâmetro foi ligeiramente inferior no terceiro caso com menor desvio padrão.

Tabela 7 – Resultado Final Independência de Parcel

Referência nos gráficos	SMD médio [μm]	Desvio padrão	Desvio Padrão / SMD [%]
Parcels 1	28,74	0,63	2,19
Parcels 2	28,77	0,53	1,84
Parcels 3	28,71	0,33	1,17
Parcels 4	28,79	0,43	1,49

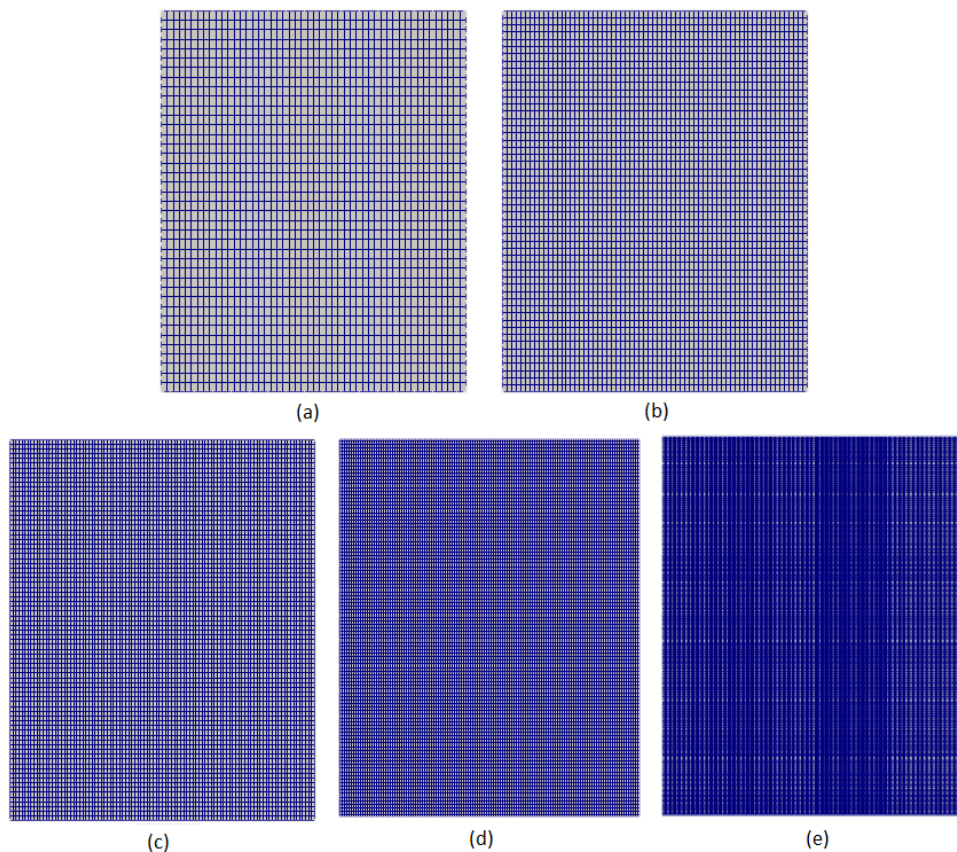
3.1.4 Independência de malha

Gradualmente o tamanho médio da malha foi reduzido até se encontrar um valor adequado para a simulação. Na Tabela 8 são apresentados os números de elementos no domínio para cada malha e quantas vezes a malha foi refinada em relação à malha anterior. Na Figura 32 está representada uma vista do tamanho da malha bem como o refinamento de 32 (a) até (e) .

Tabela 8 – Independência de Malha

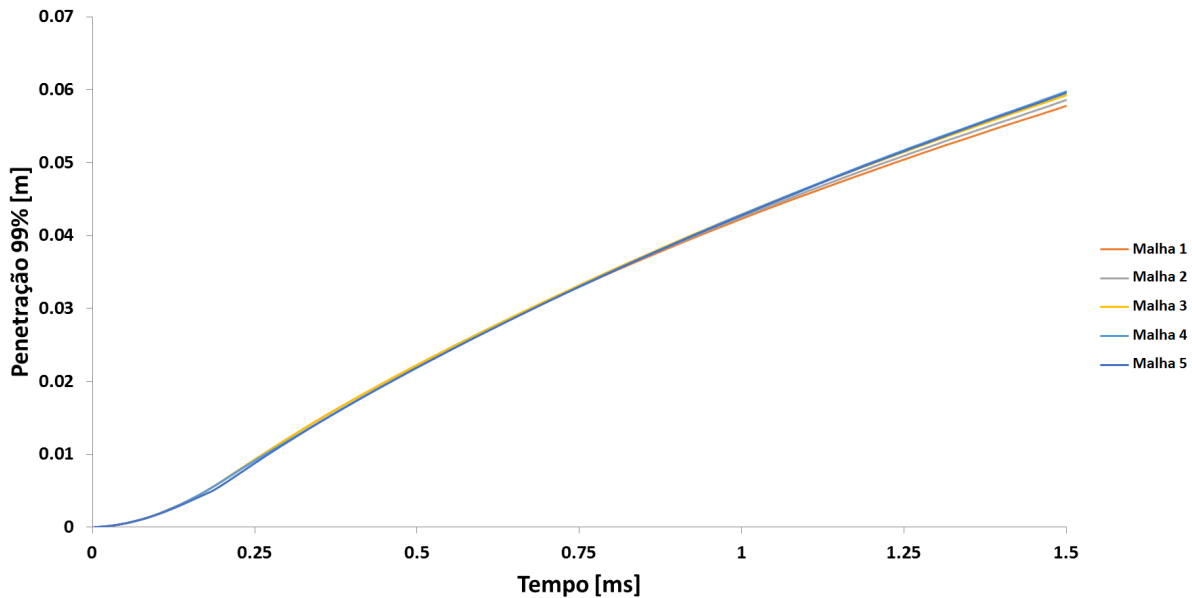
Referência nos gráficos	Número de elementos no domínio	Incremento relativo ao caso anterior
Malha 1	80.000	NA
Malha 2	188.203	2,4
Malha 3	640.000	3,4
Malha 4	1.494.388	2,3
Malha 5	5.120.000	3,4

Figura 32 – Visão Lateral do tamanho de elementos do domínio



Na Figura 33 é apresentada para cada malha, a curva de penetração em função do tempo de injeção, mostrando que quanto mais refinada a malha, maior é a penetração do fluido, o que é também foi observado em outros trabalhos (Huang; Lipatnikov, 2004).

Figura 33 – Curva de Penetração versus o Tempo de Injeção



Na Figura 34 é mostrado o detalhe da curva de penetração ao final da injeção, onde é mais fácil de se avaliar o efeito do refino de malha. Para cada malha, foi determinada a curva de SMD em função do tempo de injeção, apresentadas na Figura 35. O SMD determinado em um plano a 8 mm não é muito influenciado pela diminuição do tamanho de elemento de malha, o que também foi observado no trabalho de (Huang; Lipatnikov, 2004).

Na Tabela 9 são apresentados, para cada malha, os valores calculados do diâmetro médio SMD, da penetração 99% final e da sua diferença com relação à malha anterior. A malha 4 com 1.494.388 elementos e um tamanho médio de 0,8mm de elemento foi escolhida para a simulação final, pois a variação da penetração com o refino da malha é, nesse caso, inferior a 1,00%.

3.1.5 Análise do passo de tempo

Para analisar a sensibilidade do passo de tempo adaptativo, foram empregados quatro números de Courant (CFL) máximos, que determinam o tamanho do elemento de tempo empregado na simulação, apresentados na Tabela 10.

Figura 34 – Detalhe ao final da Curva de Penetração

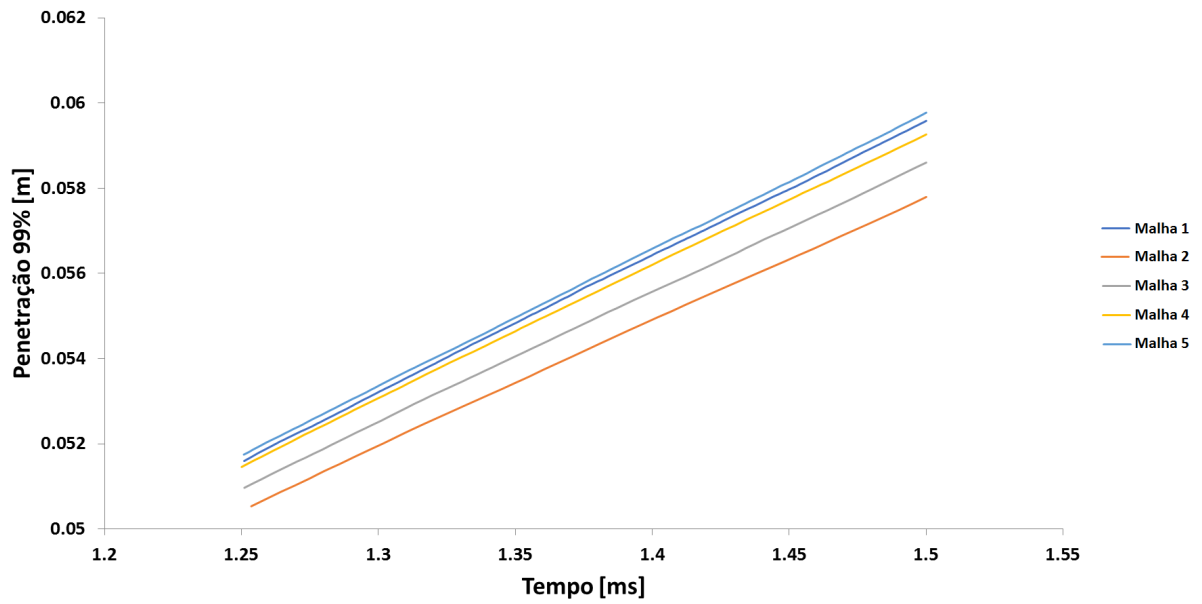


Figura 35 – Curva de SMD versus o Tempo de Injeção

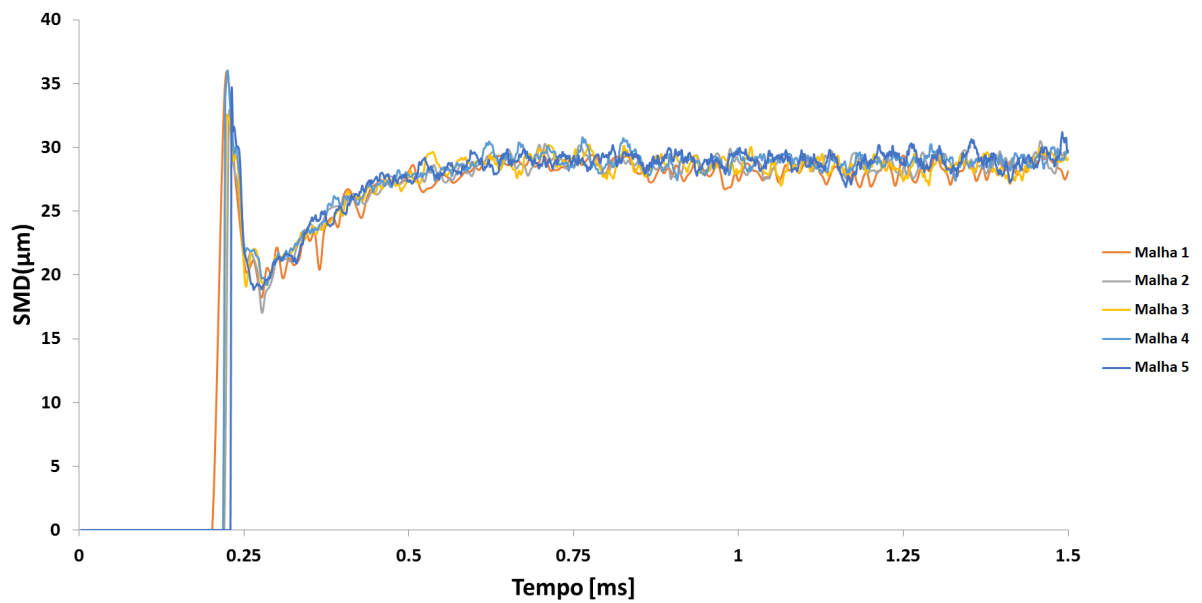


Tabela 10 – Independência do CFL

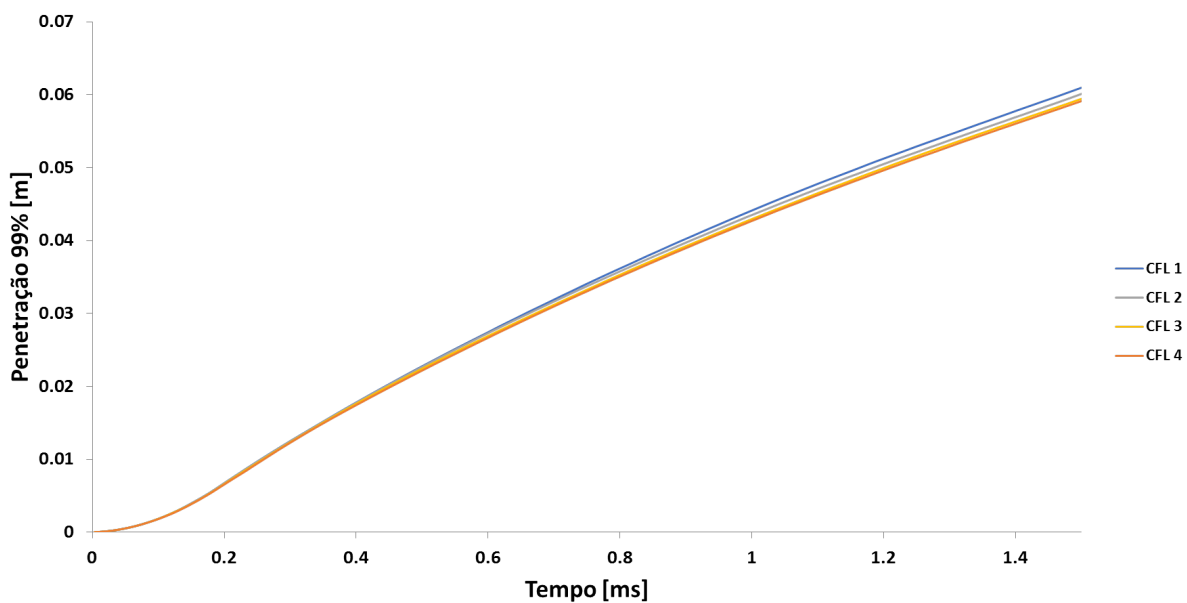
Referência nos gráficos	Número de Courrant Máximo
CFL 1	0,5
CFL 2	0,25
CFL 3	0,1
CFL 4	0,05

Tabela 9 – Resultado final da independência de malha

Referência nos gráficos	Penetração 99% Final [cm]	Diferença para o caso anterior [%]	SMD médio [μm]	Diferença para o caso anterior [%]
Malha 1	5,78	NA	28,29	NA
Malha 2	5,86	1,40	28,77	1,68
Malha 3	5,93	1,12	28,69	0,28
Malha 4	5,98	0,86	29,07	1,34
Malha 5	5,96	0,32	29,07	0,17

Na Figura 36 é apresentada a curva de penetração em função do tempo de injeção, para cada valor do CFL. É possível observar que refinando o passo de tempo a penetração do *spray* diminui.

Figura 36 – Curva de Penetração versus o Tempo de Injeção



Na Figura 37 é mostrado o detalhe da curva de penetração ao final da injeção para cada valor de CFL, onde é mais fácil de se avaliar o efeito do refino do passo de tempo.

Na Figura 38 é mostrada a curva de SMD em função do tempo de injeção, para cada valor de CFL empregado. É possível se observar que o valor calculado do SMD em um plano a 8 mm é ligeiramente influenciado pela diminuição do tamanho de elemento de tempo na simulação, apresentando uma pequena diminuição.

Finalmente, com base nos valores calculados de penetração, diâmetro de gota SMD para cada valor de CFL máximo empregado, e suas diferenças com relação ao valor anterior, Figuras 38, 34 e Tabela 11, é definido o valor de 0,1 para o CFL máximo da simulação de *spray* de combustível. Com essa escolha, o passo de tempo deverá ser adaptado a cada

Figura 37 – Detalhe ao final da Curva de Penetração

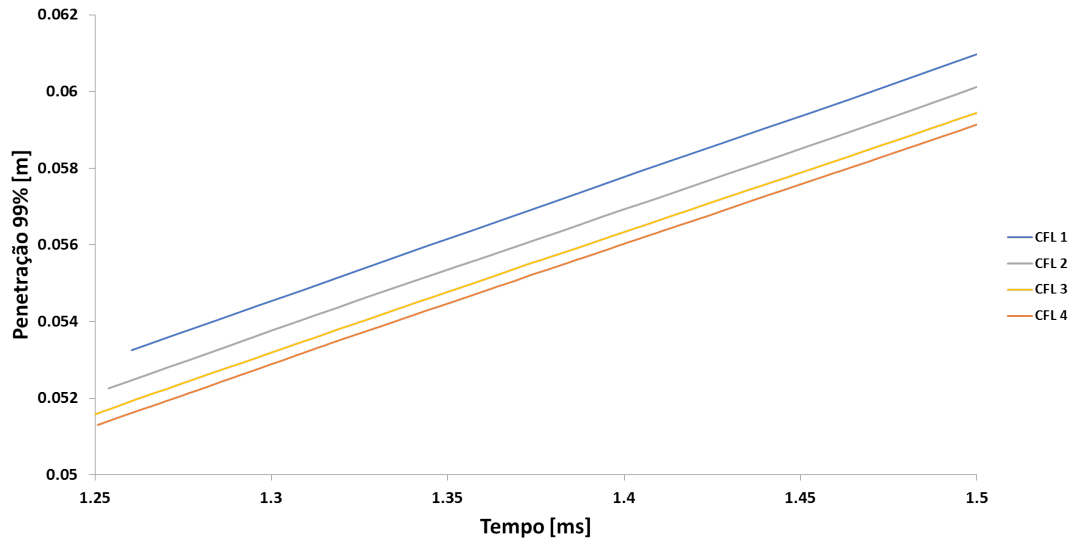


Figura 38 – Curva de SMD versus o Tempo de Injeção

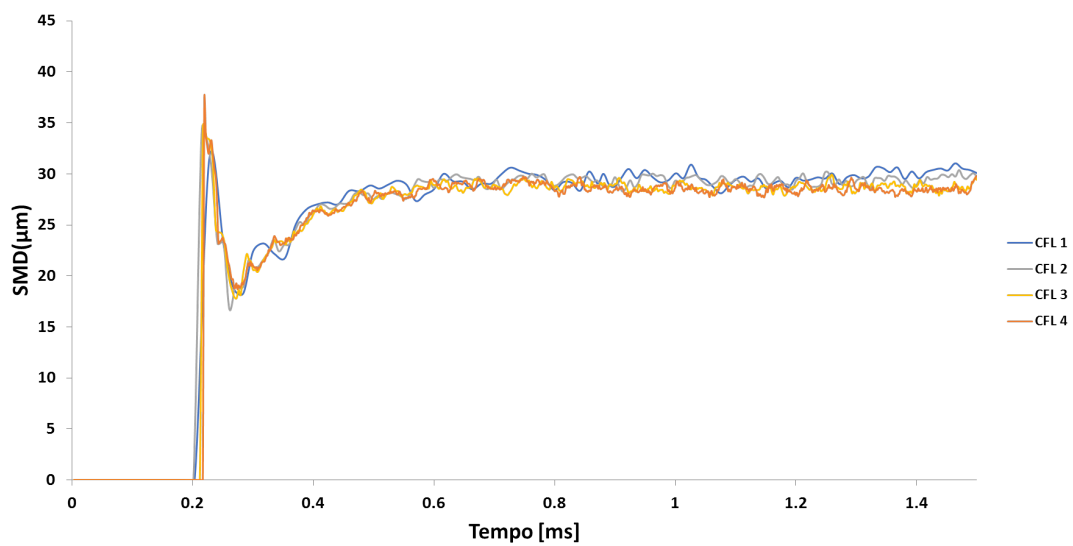


Tabela 11 – Resultado final da independência de malha

Referência nos gráficos	Penetração 99% Final [cm]	Diferença para o caso anterior [%]	SMD médio [μm]	Diferença para o caso anterior [%]
CFL 1	6,09	NA	30,18	NA
CFL 2	6,01	1,40	29,53	2,15
CFL 3	5,94	1,16	28,80	2,48
CFL 4	5,91	0,51	28,42	1,30

instante para se manter um valor do CFL médio abaixo de 0,1.

4 Resultados e Discussão

Essa seção é dividida em duas partes. Na primeira parte são apresentados os resultados da simulação do *spray* de etanol onde cada valor de contrapressão é avaliado separadamente para avaliar o efeito da contrapressão para cada modelo. Na segunda parte são discutidos os resultados agrupados por modelo numérico empregado, analisando assim a adequação de cada modelo de *spray* para descrever a influência da contrapressão. Os dados determinados na simulação numérica são comparados com os valores experimentais, obtidos por (Júnior, 2017) em um experimento descrito no Anexo A, do *spray* com E100 na pressão de injeção de 100bar e contrapressão de 1 e 5 bar.

4.1 Parte 1 - Resultados para as várias contra pressões

4.1.1 Câmara Atmosférica

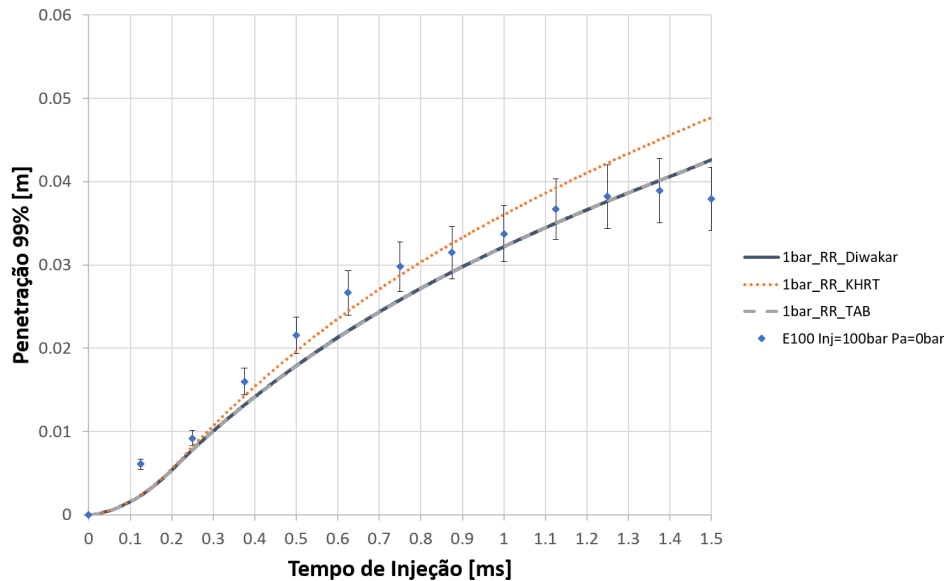
Nesse primeiro item serão discutidos os dados referentes à câmara atmosférica. A penetração do *spray* de etanol a 1bar foi modelada com os modelos de *Rosin Rammler* e *LISA* e a quebra secundária das gotas com os modelos de *Diwakar*, *KHRT* e *TAB*.

4.1.1.1 Modelo com Rosin-Rammler a 1 bar

No caso da penetração de 99% de massa do *spray* a simulação conseguiu reproduzir, dentro de 10% de erro do resultado experimental, até a faixa de 4cm de penetração, como pode ser observado na Figura 39, que mostra a penetração do *spray* em função do tempo de injeção, onde os pontos representam os valores experimentais e as curvas os modelos empregados na simulação numérica. As curvas da simulação numérica apresentam concordância com o comportamento do *spray* experimental até a região de 4cm. Isso ocorre devido à limitação da janela de medição que é de 4cm para a medição da penetração. Por isso, a partir do ponto de 1[ms] o resultado experimental não representa o comportamento real.

Na Figura 40, que mostra o diâmetro das gotas SMD e D10 em função do tempo de injeção em um plano a 8mm do injetor, é possível se observar como os tamanhos dos *parcels* alteram ao longo do tempo, a barra de erro fixada juntamente com o dado experimental representa um erro de 10%. Ocorre o salto dos diâmetros em 0,3ms, pois até esse instante nenhum *parcel* teria alcançado o plano, a 8mm do bico injetor. Como os *parcels* de diâmetros maiores tendem a ter maior momento e maior velocidade, eles seriam os primeiros a chegarem nesse ponto e por isso, há grande variação dos diâmetros

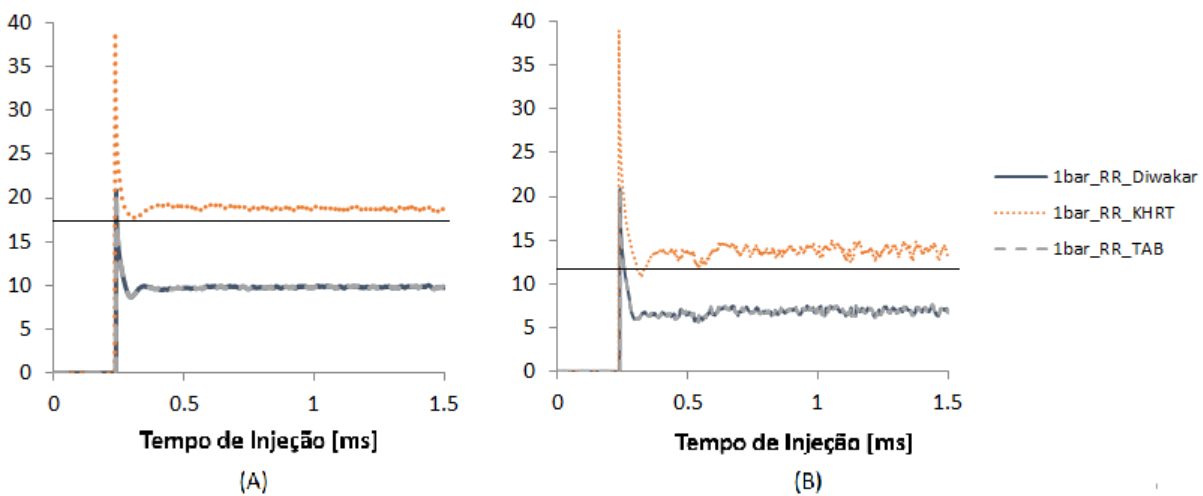
Figura 39 – Penetração do *spray* em função do tempo de injeção, calculada com o modelo de Rosin Rammler



até $25[\mu\text{m}]$. Em seguida, com a chegada das outras partículas, a média dos valores de diâmetros se estabiliza.

Foi determinado experimentalmente os valores de $16, 2[\mu\text{m}]$ para SMD e de $12, 1[\mu\text{m}]$ para D10. Esses valores estão bem representados com o modelo de quebra KHRT, como observado na Figura 40. O modelo de quebra KHRT conseguiu reproduzir de forma correta os dois tamanhos de gota determinados experimentalmente.

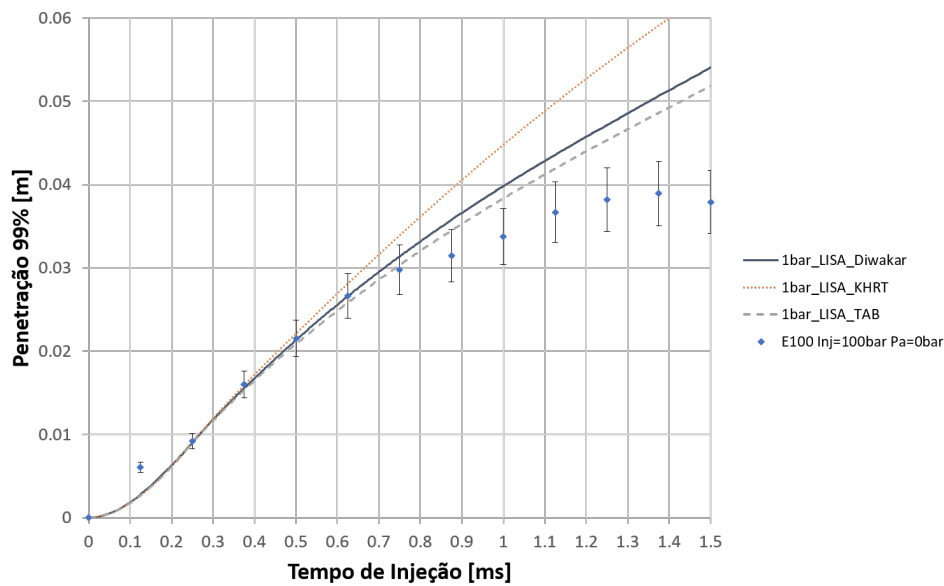
Figura 40 – Diâmetro das gotas SMD e D10 em função do tempo de injeção em um plano a 8mm do bico injetor, calculado com o modelo de Rosin Rammler



4.1.1.2 Modelo com LISA a 1 bar

A Figura 41 mostra curvas de penetração do *spray* em função do tempo de injeção, determinadas na simulação e experimentalmente, a barra de erro fixada juntamente com o dado experimental representa um erro de 10%. A partir de 1ms, próximo ao tempo em que o limite experimental de 4cm é alcançado, há uma maior divergência entre o resultado numérico e experimental, conforme esperado. Até 0,9ms tanto o modelo KHRT quanto o TAB conseguem reproduzir dentro de 10% de erro do resultado experimental.

Figura 41 – Penetração do *spray* em função do tempo de injeção, calculada com o modelo LISA



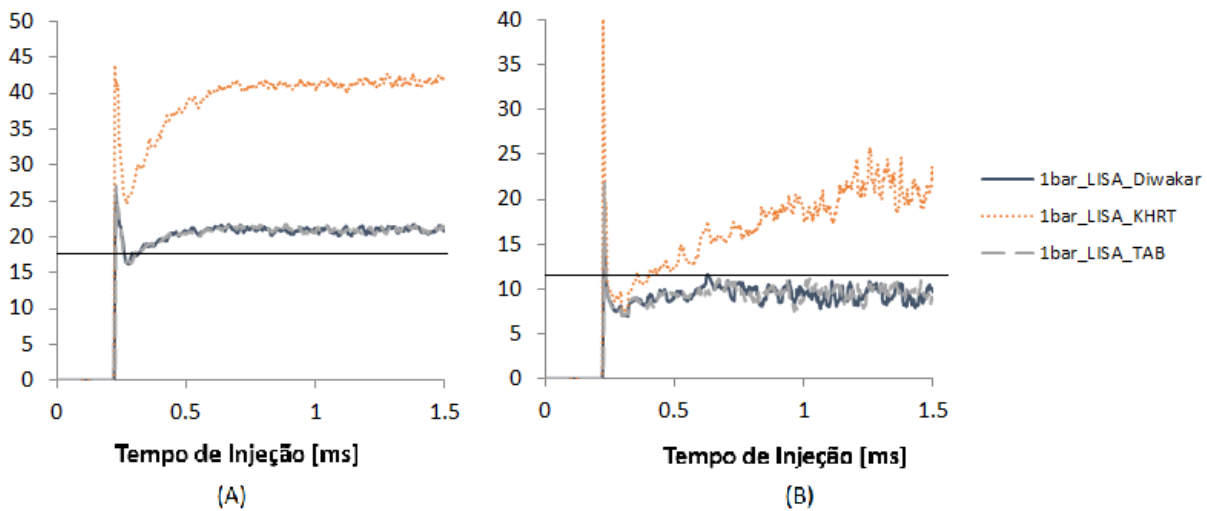
Utilizando os mesmos modelos de quebra secundária empregados anteriormente, foram calculados os diâmetros das gotas SMD e D10 em função do tempo de injeção em um plano a 8mm do bico injetor (Figura 42). Observa-se que o diâmetro das gotas final previsto nas simulações é maior que o experimental, chegando a quase 30[μm].

Concluindo, para injeção em câmara atmosférica, sem contrapressão, a penetração do *spray* a 1atm é melhor modelada com o modelos de *Rosin Rammler* e a quebra secundária das gotas com o modelo KHRT. Os resultados com esses dois modelos são os que mais se assemelham ao resultado experimental, tanto no valor do o diâmetro médio das gotas quanto na penetração do *spray*.

4.1.2 Câmara com Contrapressão de 5 bar

Para investigar a penetração do *spray* com contrapressão, foram empregados os modelos de *Rosin Rammler* e LISA, sendo que neste último o valor da constante foi alterado para casos com elevada contrapressão. Este valor é o mesmo determinado experimentalmente por (Lucchini; Errico; Nordin, 2005), para casos de contrapressão

Figura 42 – Diâmetro das gotas SMD e D10 em função do tempo de injeção em um plano a 8mm do bico injetor, calculado com o modelo LISA



atmosférica discutidos anteriormente. Assim, foi realizada a simulação sem a modificação ao modelo LISA de (Senecal et al., 1999).

4.1.2.1 Modelo Rosin-Rammler a 5 bar

Na Figura 43 são mostradas as curvas de penetração do *spray* em função do tempo de injeção, com contrapressão de 5bar, com o modelo *Rosin Rammler*, calculadas com os três modelos de quebra secundária e os valores determinados experimentalmente para o E100 com $P_{inj} = 100\text{bar}$ e $Pa = 5\text{bar}$, a barra de erro fixada juntamente com o dado experimental representa um erro de 10%. Para esse modelo de *spray* os modelos de quebra representam dentro do erro de 10% apenas após 0,8ms a penetração do *spray*. Em especial, o modelo KHRT e o TAB conseguiram reproduzir até a pequena alteração da tangente da curva de penetração em 1ms. A penetração inicial, provavelmente está alterada devido a não reprodução do pré-*spray*, que ao início da simulação representa grande parte da nuvem de gotas do *spray*. Para todos os modelos a tendência da curva de penetração foi representada na simulação.

Na Figura 44, que mostra os diâmetros das gotas SMD e D10 em função do tempo de injeção em um plano a 8mm do bico injetor, é possível observar como o tamanho dos *parcels* se comporta ao longo do tempo. Como as medições dos tamanhos de gotas foram feitos somente à pressão atmosférica, não há como comparar esses resultados com dados reais. Entretanto, como o modelo de quebra secundária que melhor reproduz o diâmetro das partículas real é o KHRT, acredita-se que esse modelo também reproduz corretamente o SMD e D10 para a injeção com contrapressão de 5bar, nos valores de $15\mu\text{m}$ e $14\mu\text{m}$.

Figura 43 – Penetração do *spray* em função do tempo de injeção, calculada com o modelo Rosin Rammler

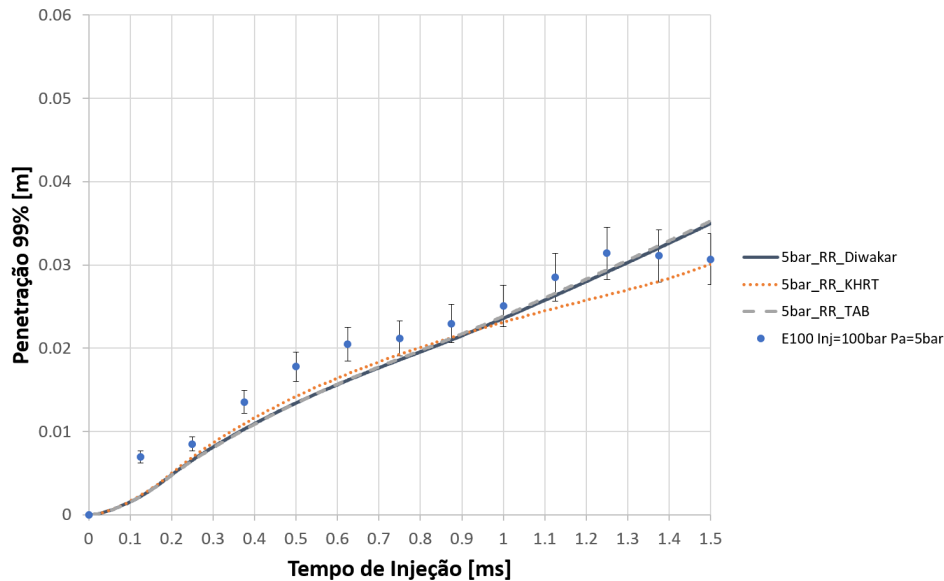
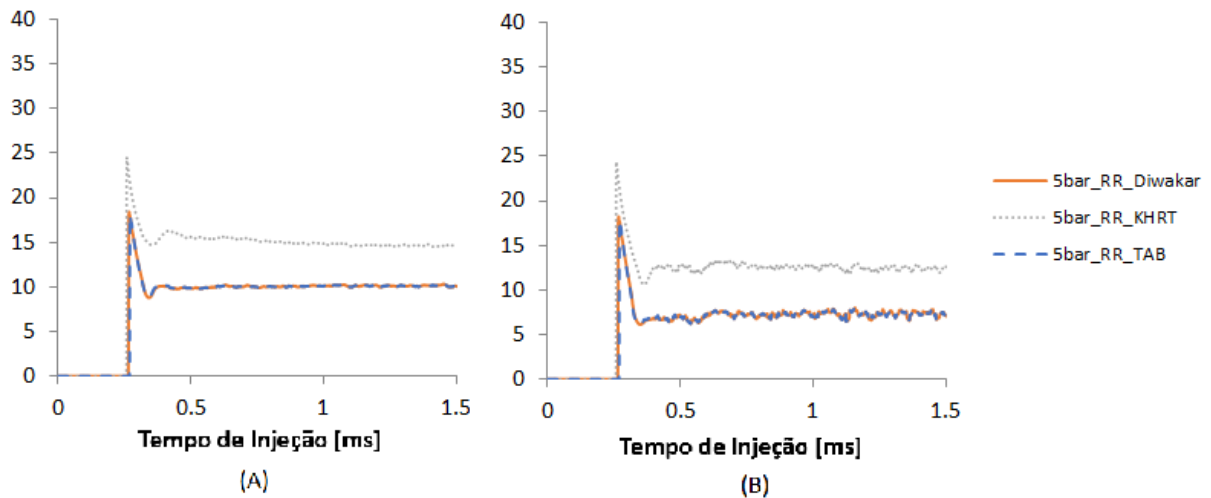


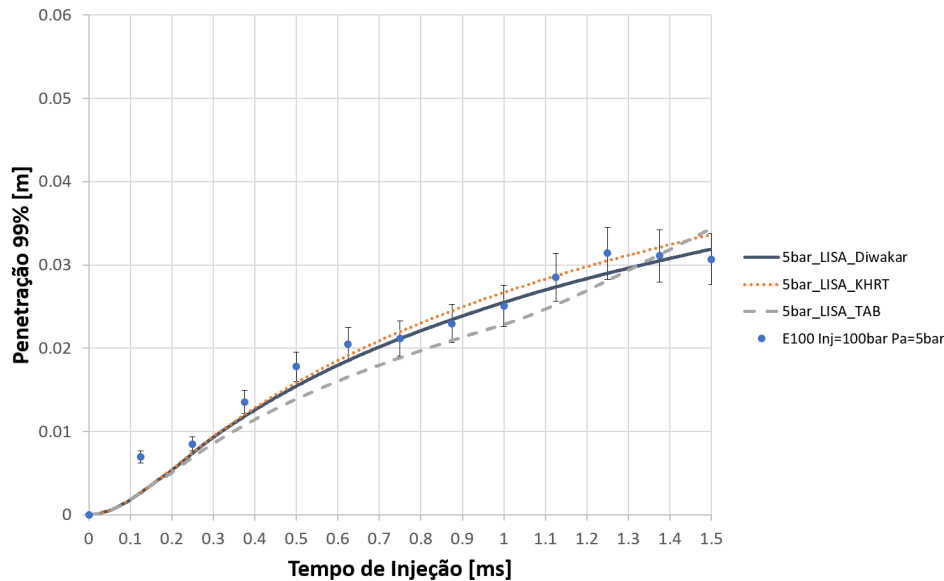
Figura 44 – Diâmetro das gotas SMD e D10 em função do tempo de injeção em um plano a 8mm do bico injetor, calculado com o modelo Rosin Rammler



4.1.2.2 Modelo LISA a 5 bar

Para a simulação do *spray* com contrapressão modelada com LISA, observa-se, na Figura 45, que a penetração foi reproduzida adequadamente com três modelos de quebra. Observando a barra de erro fixada juntamente com o dado experimental representa um erro de 10%, nota-se que a maior parte das curvas de penetração se encontram dentro desse erro. Apesar de apenas o modelo de quebra secundária TAB ter reproduzido a inflexão na curva de penetração em 1ms observada experimentalmente, os modelos de *Diwakar* e *KHRT* representaram melhor a penetração, pois o modelo TAB subestimou a maior parte dos valores experimentais.

Figura 45 – Penetração do *spray* em função do tempo de injeção, calculada com o modelo LISA



Para determinação do tamanho dos *parcels*, estão disponíveis os valores experimentais para injeção com contrapressão de 5 bar. Com base nos resultados da simulação do *spray* à pressão atmosférica, é possível pressupor que o modelo de quebra secundária KHRT deva reproduzir corretamente os diâmetros das gotas. Os valores determinados na simulação numérica apresentados na Figura 46, mostram que o modelo KHRT prevê um diâmetro maior de gota que os demais modelos. Comparando com a Figura 44, que mostra os diâmetros de gota calculados com o modelo Rosin Rammler, é possível constatar que os diâmetros de gota são determinados quando a injeção é simulada com LISA são maiores que aqueles determinados quando a injeção é simulada com o modelo *Rosin Rammler*. Isso pode ser devido ao fato de que com o modelo LISA o diâmetro dos *parcels* é efetivamente calculado no início da simulação, sem impor uma distribuição de valores iniciais, como é o caso do modelo *Rosin Rammler*.

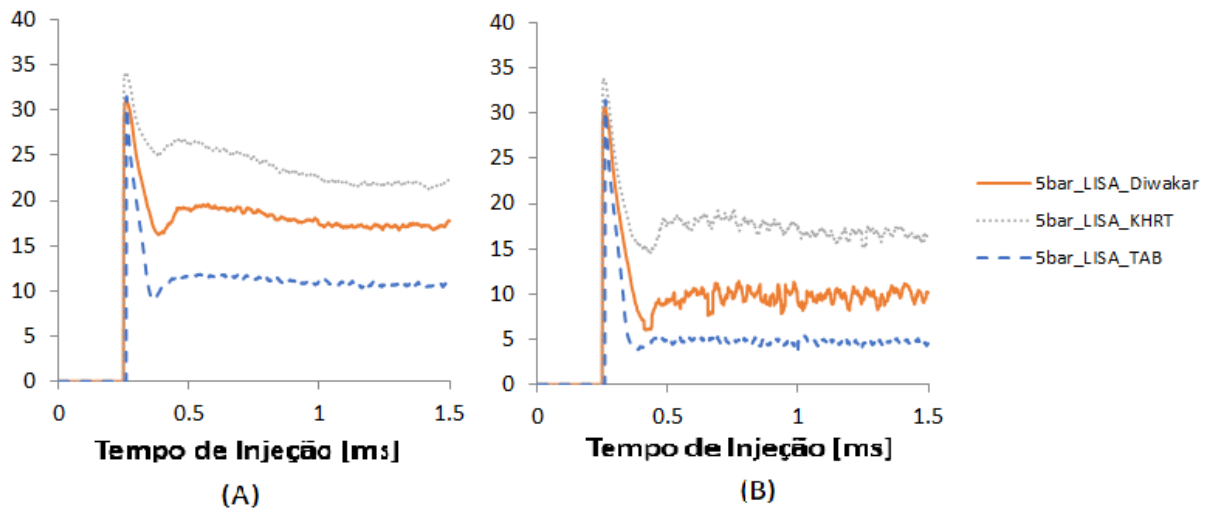
4.2 Parte 2 - Comparação dos modelos

Aqui são discutidos os resultados agrupados por modelo de *spray* empregado, analisando assim a adequação de cada modelo para descrever a influência da contrapressão.

4.2.1 Modelo LISA com Diwakar

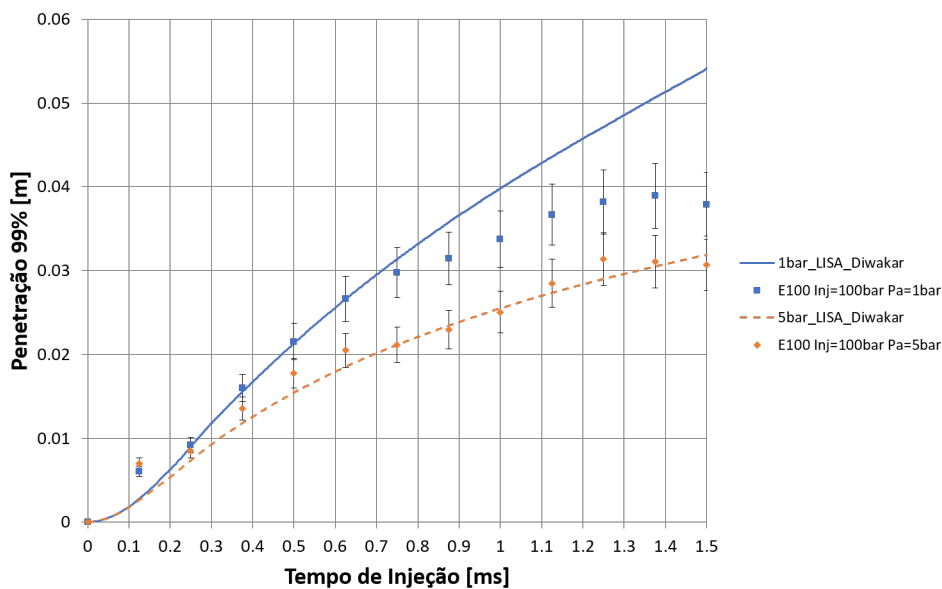
Na Figura 47 estão representadas as curvas de penetração de *spray* em função do tempo de injeção, com dois valores de contrapressão, determinadas em simulação com o modelo LISA para a atomização e o modelo Diwakar para a quebra secundária, bem como os valores obtidos experimentalmente, para todas as contrapressões, a barra de erro

Figura 46 – Diâmetro das gotas SMD e D10 em função do tempo de injeção em um plano a 8mm do bico injetor, calculado com o modelo LISA



fixada juntamente com o dado experimental representa um erro de 10%. Observa-se que essa combinação de modelos para o caso de contrapressão de 1bar há uma superestimação dos valores da penetração a partir de 0,8ms. Lembrando que a janela de medição é de apenas 4cm, a partir de 1ms os pontos experimentais determinados a baixa pressão não são relevantes.


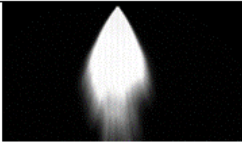


Figura 47 – Penetração 99 % do *spray* com os modelos LISA e Diwakar



Na Figura 48 é mostrada a variação da forma do *spray* determinada com os modelos de *spray* LISA e de quebra secundária Diwakar e sua comparação com o experimento, para dois valores de contrapressão, no tempo de 0,5ms, essa imagem representa uma foto lateral da nuvem do *spray*. Observa-se que essa combinação de modelos não reproduziu a

diminuição do ângulo do cone de *spray* ao se elevar a contrapressão.

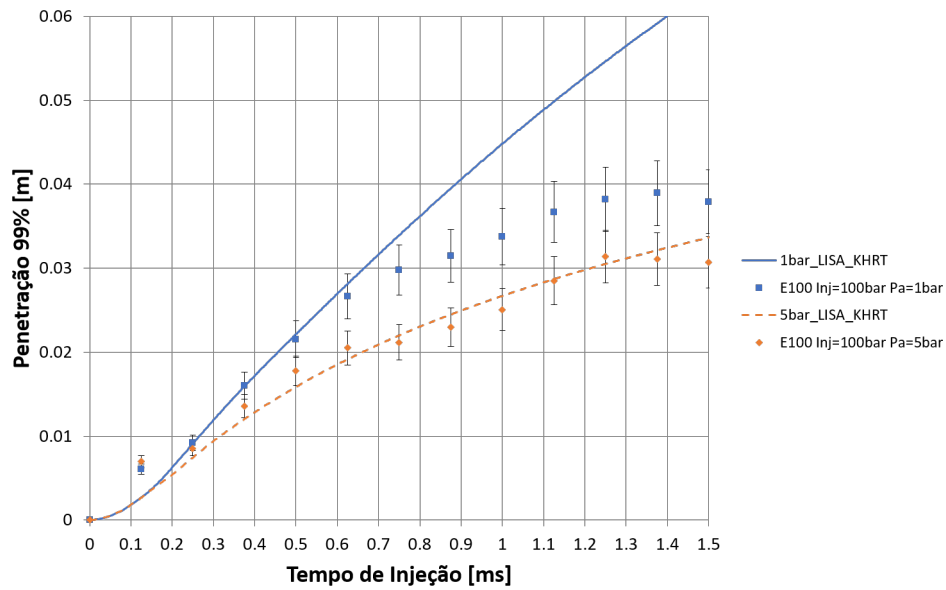
Figura 48 – Modelagem do *spray* com os modelos LISA e Diwakar

LISA + Diwakar		
Pressão na câmara = 1bar		
Tempo [ms]	Simulação	Exp
0.500		
Pressão na câmara = 5bar		
Tempo [ms]	Simulação	Exp
0.500		

4.2.2 Modelo LISA com KHRT

Na Figura 49 estão representadas as curvas de penetração de *spray* em função do tempo de injeção, determinadas na simulação com o modelo LISA para a atomização e o modelo KHRT para a quebra secundária, bem como os valores obtidos experimentalmente, para duas contrapressões, a barra de erro fixada juntamente com o dado experimental representa um erro de 10%. Observa-se, para essa combinação de modelos de *spray*, que a partir de 0,7ms a penetração do *spray* determinada na simulação numérica superestimou os valores medidos experimentalmente. Como o tamanho de gota determinado é semelhante ao valor determinado experimentalmente, provavelmente o comportamento final do *spray* deve exibir uma maior penetração ou o modelo da quebra das gotículas não atuou corretamente após o plano de 8mm correspondente ao limite de detecção experimental do SMD. Se não ocorrer a quebra das gotas, isso elevaria o diâmetro médio e isso exibiria uma maior penetração. A curva da combinação dos modelos de LISA com KHRT não representou a tendência da curva observada experimentalmente para 1 bar de contra pressão.

Na Figura 50 é mostrada a variação da forma do *spray* determinada com os modelos de *spray* LISA e de quebra secundária KHRT e sua comparação com o experimento, para dois valores de contrapressão, no tempo de 0,5ms, essa imagem representa uma foto lateral da nuvem do *spray*. Assim como observado no caso da combinação dos modelos de *spray* LISA e Diwakar, a combinação LISA e KHRT não reproduziu a diminuição do ângulo de cone com o aumento da contrapressão. Entretanto, a partir de 5bar grande parte do corpo do *spray* pode ser considerado parte ou derivado do pré *spray*. Logo, como os modelos utilizados tem a premissa de não avaliar o pré *spray* os efeitos das contrapressões somente são corretamente avaliados se os dados experimentais mostrarem separadamente o corpo do *spray* do pré *spray*.

Figura 49 – Penetração 99 % do *spray* com os modelos LISA e KHRTFigura 50 – Modelagem do *spray* com os modelos LISA e KHRT

LISA + KHRT		
Pressão na câmara = 1bar		
Tempo [ms]	Simulação	Exp
0.500		
Pressão na câmara = 5bar		
Tempo [ms]	Simulação	Exp
0.500		

Nas Figuras 51 e 52 estão apresentados, para seis valores de tempo, de 0,125ms até 0,75ms, a evolução do *spray* determinada com os modelos LISA e KHRT para contrapressões de 1 bar e 5 bar, juntamente com as imagens correspondentes do experimento, essas imagens representam uma foto lateral da nuvem do *spray*. Analisando essas imagens é possível certificar que essa combinação de modelos não é sensível o bastante para capturar de forma correta o afunilamento do cone de *spray*, mas que, após a remoção do pré *spray* o formato do corpo do *spray* determinado na simulação está condizente com o registrado experimentalmente.

Figura 51 – Evolução do *spray* determinada com os modelos LISA e KHRT com contra-pressões de 1 bar


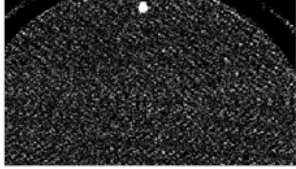









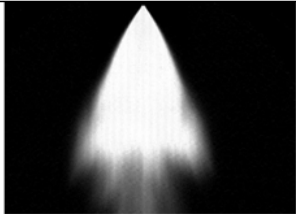

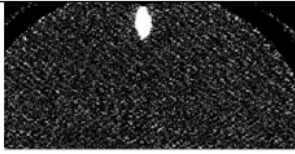










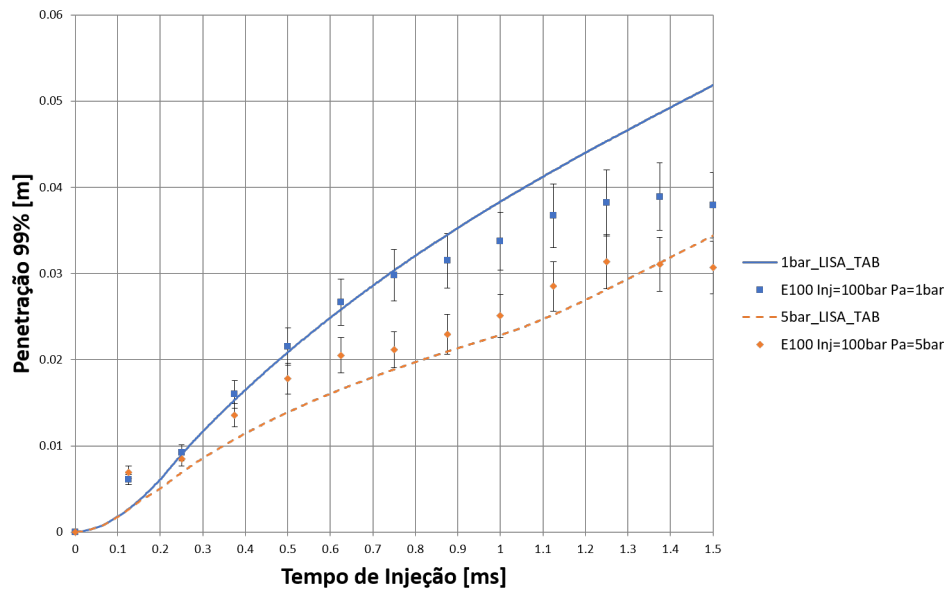
LISA – KHRT – Contrapressão = 1bar		
Tempo [ms]	Simulação	Experimento
0.125		
0.250		
0.375		
0.500		
0.625		
0.750		

Figura 52 – Evolução do *spray* determinada com os modelos LISA e KHRT com contra-pressões de 5 bar

LISA – KHRT – Contrapressão = 5bar		
Tempo [ms]	Simulação	Experimento
0.125		
0.250		
0.375		
0.500		
0.625		
0.750		

4.2.3 Modelo LISA com TAB

Na Figura 53 estão representadas duas curvas de penetração de *spray* em função do tempo de injeção, determinadas na simulação com o modelo LISA para a atomização e o modelo TAB para a quebra secundária, bem como os valores obtidos experimentalmente, para as contra-pressões, a barra de erro fixada juntamente com o dado experimental representa um erro de 10%. Observa-se que o modelo de atomização LISA em conjunto ao modelo de quebra secundária TAB reproduziu o comportamento experimental da penetração do *spray* com contra-pressão de 1bar até 0,9ms, mantendo a penetração dentro

Figura 53 – Penetração 99 % do *spray* com os modelos LISA e TAB

de um erro de 10% do dado experimental. Nas 2 combinações anteriores, a penetração se mantinha dentro desse erro apenas até 0,7ms. Mesmo para o caso com contrapressão de 5bar, a tendência da penetração foi reproduzida e boa parte da curva de penetração proveniente da simulação, manteve-se dentro desse erro de 10%.

Na Figura 54 é mostrada a variação da forma do *spray* determinada na simulação com os modelos de *spray* LISA e de quebra secundária Diwakar e sua comparação com o experimento, para dois valores de contrapressão, no tempo de 0,5ms, essa imagem representa uma foto lateral da nuvem do *spray*. Nesse caso, pode ser observado o afunilamento do cone de *spray* ao se elevar a contrapressão.

Figura 54 – Variação da forma do *spray* determinada com os modelos LISA e TAB

LISA + TAB		
Pressão na câmara = 1bar		
Tempo [ms]	Simulação	Exp
0.500		
Pressão na câmara = 5bar		
Tempo [ms]	Simulação	Exp
0.500		

Nas Figuras 53, 55 e 56, estão apresentados, para seis valores de tempo, de 0,125ms até 0,875ms, a evolução do *spray* determinada na simulação com os modelos LISA e TAB

para contrapressões de 1 bar e 5 bar, juntamente com as imagens correspondentes do experimento, essas imagens representam uma foto lateral da nuvem do *spray*. Com base nessas figuras é possível observar que esse modelo captura o afunilamento do cone de *spray* observado experimentalmente além de reproduzir com mais fidelidade a estrutura geral do *spray* registrada o experimento.

Figura 55 – Evolução do *spray* determinada com os modelos LISA e TAB para contrapressão de 1 bar


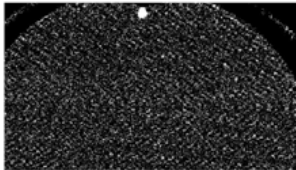









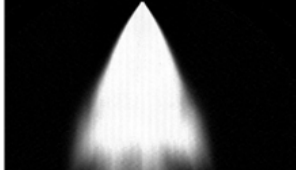

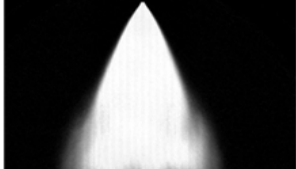

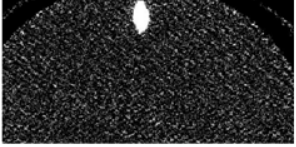



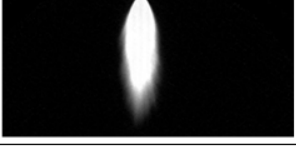








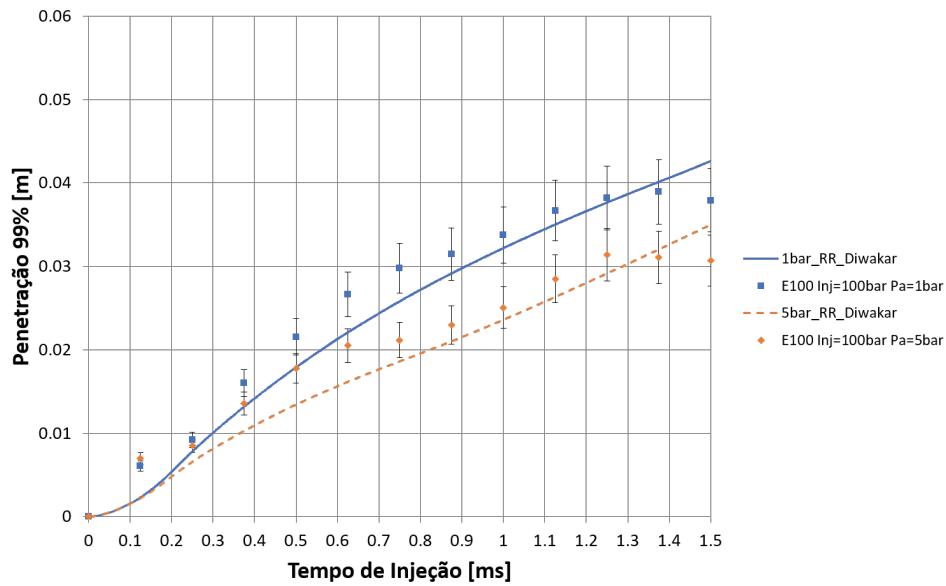
LISA – TAB – Contrapressão = 1bar		
Tempo [ms]	Simulação	Experimento
0.125		
0.250		
0.375		
0.500		
0.625		
0.750		
0.875		

Figura 56 – Evolução do *spray* determinada com os modelos LISA e TAB para contrapressão de 5 bar

LISA – TAB – Contrapressão = 5bar		
Tempo [ms]	Simulação	Experimento
0.125		
0.250		
0.375		
0.500		
0.625		
0.750		
0.875		

4.2.4 Modelo Rosin Rammler com Diwakar

Na Figura 57 estão representadas duas curvas de penetração de *spray* em função do tempo de injeção, determinadas na simulação com o modelo Rosin Rammler para a distribuição inicial de gotas e o modelo Diwakar para a quebra secundária, bem como os valores obtidos experimentalmente, para dois valores de contrapressão, a barra de erro fixada juntamente com o dado experimental representa um erro de 10%. Observa-se que para o mesmo modelo de quebra secundária, o Diwakar, a penetração é melhor descrita

Figura 57 – Penetração 99 % do *spray* com os modelos Rosin Rammler e Diwakar

quando se emprega na simulação o modelo de atomização Rosin Rammler que o LISA, apresentando a curva de penetração em sua grande parte dentro do erro de 10%, além de apresentar a mesma tendência da curva experimental.

Na Figura 58 é mostrada a variação da forma do *spray* determinada com os modelos de distribuição de gotas Rosin Rammler e de quebra secundária Diwakar e sua comparação com o experimento, para dois valores de contrapressão, no tempo de 0,5ms, essa imagem representa uma foto lateral da nuvem do *spray*. É evidente nessa imagem como que essa combinação de modelos foi efetivo em capturar o afunilamento do *spray* com o aumento da contrapressão.

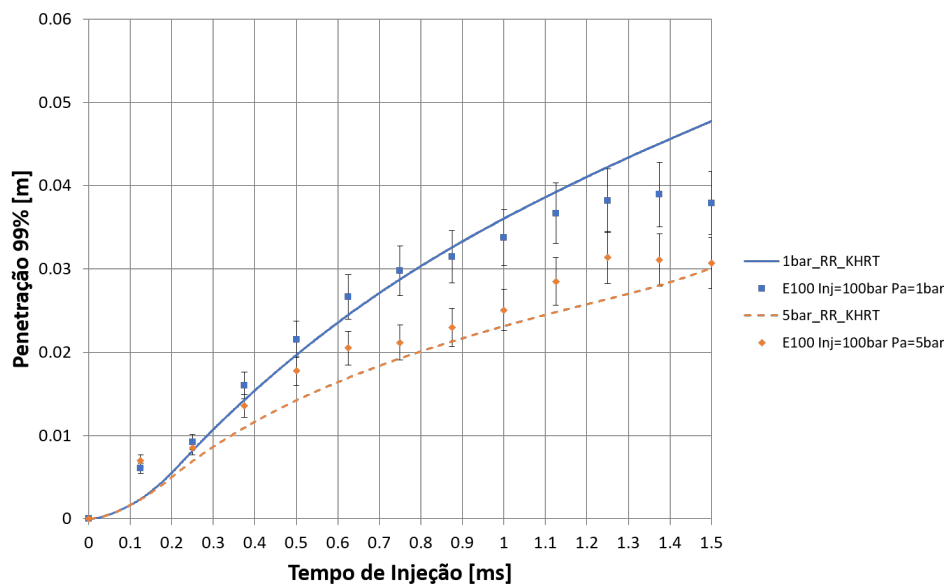
Figura 58 – Variação da forma do *spray* determinada com os modelos Rosin Rammler e Diwakar

RR + Diwakar		
Pressão na câmara = 1bar		
Tempo [ms]	Simulação	Exp
0.500		
Pressão na câmara = 5bar		
Tempo [ms]	Simulação	Exp
0.500		

4.2.5 Modelo Rosin Rammler com KHRT

Na Figura 59 estão representadas duas curvas de penetração de *spray* em função do tempo de injeção, determinadas na simulação com o modelo Rosin Rammler para a distribuição inicial de gotas e o modelo KHRT para a quebra secundária, bem como os valores obtidos experimentalmente, para dois valores de contrapressão, a barra de erro fixada juntamente com o dado experimental representa um erro de 10%. Observa-se que essa combinação de modelos também é efetiva em capturar a penetração do *spray*. Nesse caso o final da penetração é provavelmente o que ocorre no experimento, pois analisando o comportamento final do *spray* para a mesma combinação de modelos, a pressões elevadas na câmara, observa-se que a penetração tende a aumentar no final da curva.

Figura 59 – Penetração 99 % do *spray* com os modelos Rosin Rammler e KHRT



Na Figura 60 é mostrada a variação da forma do *spray* determinada com os modelos de *spray* Rosin Rammler e de quebra secundária KHRT e sua comparação com o experimento, para dois valores de contrapressão, no tempo de $0,5ms$, essa imagem representa uma foto lateral da nuvem do *spray*. Observa-se que o cone de *spray* diminuiu com o aumento da contrapressão, assim como esperado.

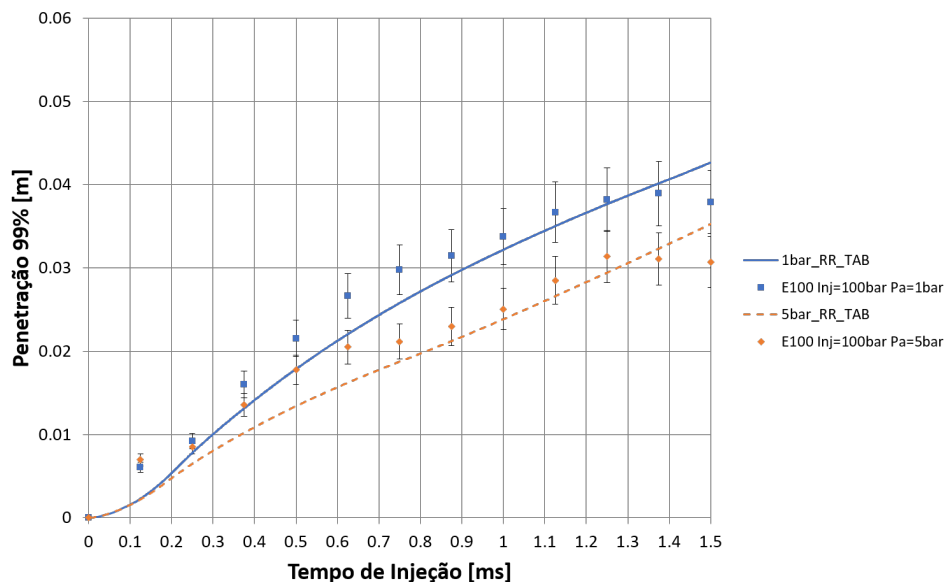
Figura 60 – Variação da forma do *spray* determinada com os modelos Rosin Rammler e KHRT

RR + KHRT		
Pressão na câmara = 1bar		
Tempo [ms]	Simulação	Exp
0.500		
Pressão na câmara = 5bar		
Tempo [ms]	Simulação	Exp
0.500		

4.2.6 Modelo Rosin Rammler com TAB

Na Figura 61 estão representadas duas curvas de penetração de *spray* em função do tempo de injeção, determinadas na simulação com o modelo Rosin Rammler para a distribuição inicial de gotas e o modelo TAB para a quebra secundária, bem como os valores obtidos experimentalmente, para dois valores de contra pressão, a barra de erro fixada juntamente com o dado experimental representa um erro de 10%. Observa-se que esse foi o melhor resultado para o final da penetração. Entretanto, os valores intermediários entre 0,5ms e 0,7ms ficaram subestimados nessa combinação de modelos.





Figura 61 – Penetração 99 % do *spray* com os modelos Rosin Rammler e TAB



Na Figura 62 é mostrada a variação da forma do *spray* determinada com os modelos de *spray* Rosin Rammler e de quebra secundária TAB e sua comparação com o experimento, para dois valores de contrapressão, no tempo de $0,5ms$, essa imagem representa uma foto lateral da nuvem do *spray*.

8

Figura 62 – Variação da forma do *spray* determinado com os modelos Rosin Rammler e TAB

RR + TAB		
Pressão na câmara = 1bar		
Tempo [ms]	Simulação	Exp
0.500		
Pressão na câmara = 5bar		
Tempo [ms]	Simulação	Exp
0.500		

4.3 Considerações Finais

Os resultados de penetração de *spray* calculados na simulação utilizando o modelo Rosin Rammler diretamente descrevem adequadamente os resultados experimentais com maior sensibilidade que o modelo LISA. O modelo LISA, como implementado no OpenFOAM, estima um valor médio de tamanho de gotas, o SMD, e o utiliza como o diâmetro médio da distribuição Rosin Rammler. O que significa que o valor determinado pelo modelo LISA é dependente da distribuição Rosin Rammler. Uma análise mais aprofundada da metodologia utilizada para implementar o modelo LISA no OpenFOAM seria desejável.

O modelo de quebra de gotas Kelvin Helmholtz, KH, não avalia a condição prevista na teoria, $B_0\Lambda_{KH} > r$, e portanto não usa a Equação 2.75, o que significa que o modelo pode não estar reproduzindo as quebras de gotas que poderiam acontecer nesse caso. Assim, as gotas permaneceriam com seu diâmetro original levando a um aumento na penetração do *spray* determinada na simulação com esse modelo. Além do mais, a correlação do tamanho médio de gotas foi feita, como no trabalho experimental, a 8mm do bico injetor, por isso não é possível avaliar a adequação dos resultados acima de $1ms$, em um próximo experimento poderiam ser avaliados mais pontos, para uma correlação em diversos pontos do corpo do *spray*.

A penetração experimental é sempre medida em relação ao corpo do *spray* desconsiderando o pré *spray*. A determinação experimental do pré *spray* é feita posteriormente por tratamento da imagem do *spray* empregando uma rotina no Matlab. Nos casos de alta pressão o corpo do *spray* e o pré *spray* se confundem, tornando o tratamento da imagem mais complexo. Portanto, é possível, no caso do experimento empregado na validação do presente trabalho, que o tratamento dos dados requisitados a alta pressão pode não ter retirado boa parte do pré *spray*, explicando assim o deslocamento constante e paralelo da curva experimental com relação às curvas de penetração do *spray* obtidas na simulação numérica para todos os modelos empregados.

Quanto ao *software* OpenFOAM, a curva de aprendizado não é semelhante a de um *software* comercial, como o Star CCM+. Para se familiarizar com o OpenFOAM, o usuário tem que se acostumar a não utilizar interfaces gráficas, a leitura e interpretação do código dos modelos e comparação com a documentação teórica pertinente a cada modelo e outros fatores, ligados a programação e utilização do Linux como sistema operacional. Entretanto, ao final desse processo inicial, o usuário estará apto a alterar ou incluir qualquer modelo na simulação.

Nesse trabalho foi utilizado um computador com sistema operacional LINUX, com processador Intel i7, 16Gb de memória RAM. A simulação que mais necessitou de poder computacional levou 4 horas para ser finalizada com 4 núcleos, demonstrando assim que o OpenFOAM é bem robusto para rodar casos complicados como o de *spray*.

5 Conclusão

A metodologia utilizando o *software* OpenFOAM para simular o *spray* foi validada com dados experimentais para valores de contrapressões até 5 bar, para os quais os modelos implementados representam adequadamente a tendência do *spray* de etanol dentro de um erro de 10%. Em condições normais de operação de um motor, um injetor automotivo não irá operar a pressões maiores do que 5bar no momento da injeção. Portanto, essa metodologia validada de um *spray* de etanol poderá ser empregada na próxima etapa de se simular um motor Otto, operando com etanol. Essa próxima etapa seria de se simular o *spray* em um domínio de malha móvel.

A metodologia também determinou uma distribuição de tamanhos de gotas adequada para o injetor empregado, e com ótima correlação com os dados experimentais a 1bar, mantendo os dados de distribuição de gotas dentro de 15% de erro em relação aos dados experimentais. Apesar de não haver dados experimentais para as demais pressões, apenas com base nos resultados da pressão atmosférica, acredita-se que o modelo de *break up* secundário, KHRT representa corretamente os diâmetros reais das gotas a 8mm do bico do injetor.

Para pressões até 5 bar, dentre os modelos avaliados os que melhor representam o comportamento do *spray* ao longo do tempo de injeção são o modelo de atomização LISA em conjunto com o modelo de quebra secundária TAB e o modelo de distribuição de gotas Rosin-Rammler em conjunto com os modelos de quebra secundária KHRT ou TAB.

Para valores de contrapressão acima de 5 bar os resultado de penetração de *spray* de etanol mostraram a necessidade de avaliar numericamente o pré *spray*, que constitui grande parte do corpo do *spray*. Essa avaliação possibilitaria o emprego da metodologia para condições de injeção mais extremas, como em um momento próximo ao PMS (antes da combustão).

Os objetivos do trabalho foram alcançados, ao implementar no laboratório do CTM uma metodologia para simulação de *spray* empregando o *software* de código aberto OpenFOAM.

5.1 Sugestão para trabalhos futuros

A seguir serão apresentadas algumas sugestões de trabalhos futuros com o OpenFOAM que podem complementar o conhecimento atual de ICE:

- Inclusão de um modelo que avalie o pré *spray*;

- Avaliar um modelo de *spray* com malha adaptativa;
- Avaliar um injetor do tipo multifuro;
- Avaliar dinamicamente, os efeitos do *spray* na mistura do ar combustível dentro de um Motor Monocilíndrico de Pesquisa, sem combustão;
- Testar múltiplas injeções para otimização da formação de mistura;
- Simular em conjunto o modelo de *spray* com o módulo de motor de combustão interna e validar com dados experimentais.

Referências

- Alex Kierstein. *Why Mazda's Skyactive-X compression-ignition engine is a smart hedge bet.* 2017. Disponível em: <<https://www.autoblog.com/2017/08/08/analysis-mazda-skyactiv-x-compression-ignition-engine-smart-hedge/>>.
- Allocca, L. et al. Experimental Validation of a GDI Spray Model Reprinted From : Direct Injection SI Engine Technology. 2002.
- Almeida, H. A. de et al. Numerical Droplet Distribution for Ethanol Spray With OpenFOAM. *CONEM*, 2016.
- Amorim, F. G. L. *Metodologia Numérica Para Caracterização Da Injeção De Combustível E Formação Da Mistura Para Desenvolvimento De Motores De Combustão Interna.* 1–138 p. Dissertação (Mestrado), 2016.
- Babinsky, E.; Sojka, P. Modeling drop size distributions. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 28, n. 4, p. 303–329, 2002. ISSN 03601285. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360128502000047>>.
- Basshuysen, R. *Ottomotor mit Direkteinspritzung.* [s.n.], 2007. 213–248 p. ISBN 9783834802026. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8348-0354-2>>.
- Basshuysen, R. V. *Internal Comb. Engine Hndbk. - Part 1.* [S.l.: s.n.], 2004. ISBN 9780768071962.
- Battistoni, M.; Xue, Q.; Som, S. Large-Eddy Simulation (LES) of Spray Transients : Start and End of Injection Phenomena. *Oil and Gas Science and Technology - Revue d'IFP Energies nouvelles*, v. 71, n. 1, p. 24, 2016. ISSN 1294-4475.
- Baumgarten, C. *Mixture formation in internal combustion engines.* [S.l.: s.n.], 2006. 294 p. ISSN 1860-4846. ISBN 3540308350.
- Bellman, R., Pennington, R. *Effects of surface tension and viscosity on Taylor instability.* 151 p. Tese (Doutorado), 1953.
- Braga, R. M. et al. 3D Numerical Characterization of a Multi - Holes Injector in a Quiescent Vessel and its Application in a Single - Cylinder Research Engine Using Ethanol. *SAE International*, 2017.
- Brereton, G. A discrete multicomponent temperature-dependent model for the evaporation of spherical droplets. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 60, p. 512–522, may 2013. ISSN 00179310.
- Chemical, G.-p. A software package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics. *Design*, n. September, p. 1–181, 2000. Disponível em: <<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/21821594>>.
- Daeyup, L. et al. Observation of Flame Propagation in an LPG Lean Burn SI Engine. *SAE Technical*, n. 1999-01-0570, 1999.

- DieselNet. *Brazil: Light-Duty Vehicles*. 2017. Disponível em: <<https://www.dieselnets.com/standards/br/ld.php>>.
- ECN. *Engine Combustion Network*. 2018. Disponível em: <<http://www.cmt.upv.es/ECN03.aspx>>.
- Elwardany, A. E.; Sazhin, S. S.; Farooq, A. Modelling of Heating and Evaporation of Gasoline Fuel Droplets : A Comparative Analysis of Approximations. *Fuel*, v. 111, n. September 2013, p. 643–647, 2013.
- ESI GROUP. *OpenCFD*. 2010. Disponível em: <www.openfoam.org>.
- Faghri, Y. Z. A. *Transport Phenomena in Multiphase Systems*. [S.l.: s.n.], 2006. ISBN 9780123706102.
- Fraidl, G. K.; Piock, W. F.; Wirth, M. Gasoline Direct Injection : Actual Trends and Future Strategies for Injection and Combustion Systems. n. 412, 1996.
- Ghadimi, P.; Yousefifard, M.; Nowruzi, H. Applying Different Strategies within OpenFOAM to Investigate the Effects of Breakup and Collision Model on the Spray and in-Cylinder Gas Mixture Attribute. *Journal of Applied Fluid Mechanics*, v. 9, n. 6, p. 2781–2790, 2016.
- Gong, C. et al. Effect of compression ratio on performance and emissions of a stratified-charge DISI (direct injection spark ignition) methanol engine. *Energy*, Elsevier Ltd, v. 96, n. X, p. 166–175, 2016. ISSN 03605442. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.energy.2015.12.062>>.
- Guzzo, M. E. *Metodologias para Análise e Caracterização dos Sprays de um Injetor de Injeção Direta de Gasolina*. 153 p. Dissertação (Mestrado), 2012. Disponível em: <<http://hdl.handle.net/1843/BUOS-95RHVS>>.
- Han, Z. et al. *Modeling Atomization Processes of Pressure Swirl Hollow-Cone Fuel Sprays*. 1997.
- Heywood, J. B. *Internal combustion engine fundamentals*. [S.l.: s.n.], 1988. 750 p. ISSN 00710049. ISBN 007028637X.
- Hindi, G. d. Q.; Pimenta, A. P. Numerical simulation on influence of the spray injector type in a disI engine at part-load under stratified operation. *SAE Technical Papers*, 2011. Disponível em: <<http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-84881208737&partnerID=40&md5=bb946e9771e4648b43339fa7a2>>.
- Huang, C. *Numerical Modelling of Fuel Injection and Stratified Turbulent Combustion in a Direct-Injection Spark-Ignition Engine Using an Open Source Code*. Tese (Doutorado), 2014.
- Huang, C.; Lipatnikov, A. Modelling of Hollow-Cone Gasoline and Ethanol Sprays Using OpenFOAM 2 . Spray Models Implemented into the Standard OpenFOAM. *SAE International*, p. 1–37, 2004.
- Huang, C.; Lipatnikov, A. Modelling of Gasoline and Ethanol Hollow-Cone Sprays Using OpenFOAM. *SAE Paper*, p. 327–344, 2011. ISSN 0148-7191.

Huang, C.; Yasari, E.; Lipatnikov, A. A Numerical Study on Stratified Turbulent Combustion in a Direct-Injection Spark-Ignition Gasoline Engine Using an Open-Source Code. *SAE International*, n. 2014-01-1126, 2014. ISSN 0148-7191.

Jan Berkeley. *The death of the internal combustion engine*. 2017. Disponível em: <<https://www.economist.com/news/leaders/21726071-it-had-good-run-end-sight-machine-changed-world-death>>.

Jasak, H.; Weller, H. G.; Nordin, N. In-cylinder {CFD} simulation using a {C}++ object-oriented toolkit. *SAE International*, p. 81–188, 2004.

Júnior, C. A. G. *Análise Da Influência Da Pressão De Injeção, Contrapressão Ambiente E Tipo De Combustível Nos Parâmetros Da Atomização De Um Injetor De Injeção Direta De Combustível High - Pressure Swirl*. Dissertação (Mestrado), 2017.

Kah, D.; V. Mittal, S.; Pitsch, H. LES of spray and combustion in an internal combustion engine. *Center for Turbulence Research*, p. 43–54, 2012.

Law, D. et al. Controlled Combustion In an IC Engine with a Fully Variable Valve Train. *SAE Technical Paper 2001-01-0251*, n. 724, 2001.

Lefebvre, A. H. *Atomization and Sprays*. [s.n.], 1989. v. 45. 1435 p. ISSN 00092509. ISBN 0891166033. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/000925099087140N>>.

Liu, A. B.; Mather, D.; Reitz, R. D. Modeling the Effects of Drop Drag and Breakup on Fuel Sprays. *SAE International Congress and Exposition*, v. 298, n. 412, p. 1–6, 1993. ISSN 0148-7191.

Lucchini, T.; Errico, G. D.; Nordin, N. CFD Modelling of Gasoline Sprays. *SAE Technical Paper*, v. 2005-24-08, 2005. ISSN 01487191.

Mayer, L. R. ANÁLISE NUMÉRICA DO SPRAY ETANOL EM CÂMARA ATMOSFÉRICA. 2012.

Moukalled, F.; Mangani, L.; Darwish, M. *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics - An Advanced Introduction with OpenFOAM and Matlab*. [S.l.: s.n.], 2016. M. 799 p. ISBN 9783319168739.

Mugele, R. A.; Evans, H. D. Droplet size distribution in sprays. *Industrial & Engineering Chemistry*, v. 43, n. 6, p. 1317–1324, 1951. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/ie50498a023>>.

Norbert, P. *Turbulent Combustion*. 2000.

Ohnesorge, W. Die Bildung von Tropfen aus Dusen beim Zerfall flüssiger Strahlen. *Zeitschrift des Vereines deutscher Ingenieure*, 1931.

Park, S. H. et al. Atomization and spray characteristics of bioethanol and bioethanol blended gasoline fuel injected through a direct injection gasoline injector. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Elsevier Inc., v. 30, n. 6, p. 1183–1192, 2009. ISSN 0142727X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2009.07.002>>.

Park, W. et al. Use of Multiple Injection Strategies to Reduce Emission and Noise in Low Temperature Diesel Combustion. *SAE International*, 2015.

Paul A. Eisenstein. *Not Dead Yet: Internal Combustion Engine Gets a Reprieve*. 2017. Disponível em: <https://www.nbcnews.com/business/autos/not-dead-yet-internal-combustion-engine-gets-reprieve-n793236?lipi=urn\%3Ali\%3Apage\%3Ad_flagship3_feed\%3BL8mCjwWdSHqneo3PeMMgw\%3D\%3D>.

Ribeiro, J. H. M. Análise Numérica Da Turbulência No Escoamento De Ar Em Motor Monocilíndrico. 2014.

Ribeiro, M. D. et al. Engine and Spray Simulations. *CIMCCO*, 2016.

Rocha, D. D. da. Caracterização do spray de etanol utilizando técnicas numéricas de simulação com validação experimental. 2015.

Schmidt, D. P. et al. Pressure-Swirl Atomization in the Near Field. *SAE Technical Paper*, v. 1999, n. 1999-01-0496, 1999.

Schor, R. R. et al. Numerical Comparison of an Ethanol Spray Using Open FOAM and Star CCM+. *CILAMCE*, p. 1–4, 2017.

Senecal, P. K.; Pomraning, E.; Richards, K. J. An Investigation of Grid Convergence for Spray Simulations using an LES Turbulence Model. *SAE Technical Paper*, n. 2013-01-1083, 2013.

Senecal, P. K. et al. A New Parallel Cut-Cell Cartesian CFD Code for Rapid Grid Generation Applied to In-Cylinder Diesel Engine Simulations. *SAE Technical Paper*, v. 2007, n. 724, p. 776–790, 2007.

Senecal, P. K. et al. Modeling high-speed viscous liquid sheet atomization. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 25, n. 6-7, p. 1073–1097, 1999. ISSN 03019322.

Shi, Y.; Hai-Wen, G.; Reitz, R. D. *Computational Optimization of Internal Combustion Engines*. [S.l.: s.n.], 2014. 1–5 p. ISSN 13514180. ISBN 9780874216561.

Shim, Y. S.; Choi, G. M.; 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*, v. 22, n. 2, p. 320–329, 2008. ISSN 1738494X.

Smits, J. J. M. Modelling of a fluid flow in an internal combustion engine. *Eindhoven University of Technology. Department of Mechanical Engineering.*, p. 13–60, 2006.

Stuhldreher, M. et al. Downsized Boosted Engine Benchmarking and Results. *SAE International*, v. 2015-01-12, 2015.

Su, T. F. et al. Experimental and Numerical Studies of High Pressure Multiple Injection Sprays. *SAE Technical Paper*, n. 412, 1996. Disponível em: <<http://papers.sae.org/960861/>>.

Timmers, V. R.; Achten, P. A. Non-exhaust PM emissions from electric vehicles. *Atmospheric Environment*, Elsevier Ltd, v. 134, p. 10–17, 2016. ISSN 18732844. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.03.017>>.

Versteeg, H. K.; Malalaskera, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*. [S.l.: s.n.], 2007. M. ISBN 9780131274983.

Wang, X. et al. Spray Characteristics of High-Pressure Swirl Injector Fueled with Methanol and Ethanol. *Energy & Fuels*, v. 19, n. 6, p. 2394–2401, 2005. ISSN 0887-0624. Disponível em: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ef050135w>>.

Weller, H. *The OpenFOAM Foundation*. 2010. Disponível em: <www.openfoam.org>.

White, F. M. *Fluid Mechanics*. *McGraw-Hill*, p. 1024, 2009.

Wirth, M. et al. Turbocharging the DI Gasoline Engine Reprinted From : Direct Injection SI Engine Technology 2000. v. 2000, n. 724, 2000.

Zhang, S. et al. Development of New I3 1.0L Turbocharged DI Gasoline Engine. *SAE International*, 2017.

Anexos

ANEXO A – Metodologia Experimental

Aqui é apresentada de uma maneira geral a metodologia utilizada na obtenção dos dados experimentais que foram utilizados na validação dos resultados da simulação numérica do presente trabalho. Para maiores informações em relação ao experimento é recomendada uma leitura do trabalho de (Júnior, 2017)

A.1 Descrição do Experimento

Nos ensaios de injeção de *spray* realizados por (Júnior, 2017) foi utilizado o injetor *high-pressure swirl* da Magneti Marelli modelo IWD3+ 1933. Esse injetor está apresentado na Figura 64 e suas características estão relacionadas na Tabela 12. Um cilindro de nitrogênio pressurizado é ligado a um vaso de pressão, Figura 63, com os fluidos de teste dentro do mesmo para fornecer a pressão de injeção desejada. O vaso de pressão conecta-se, através da mangueira flexível, ao injetor colocado na parte superior da câmara de testes. As pressões de injeção empregadas são de 80 bar e 100 bar e as contrapressões empregadas na câmara de testes, também pressurizada por um cilindro de nitrogênio, são de 10 bar e pressão atmosférica. Os combustíveis estudados são o etanol hidratado (E100), simulacro Exxsol D60, fluido que simula as propriedades do etanol, e água destilada e deionizada. Na tabela 13 estão relacionadas as propriedades físico-químicas dos fluidos na temperatura padrão de 20°C.

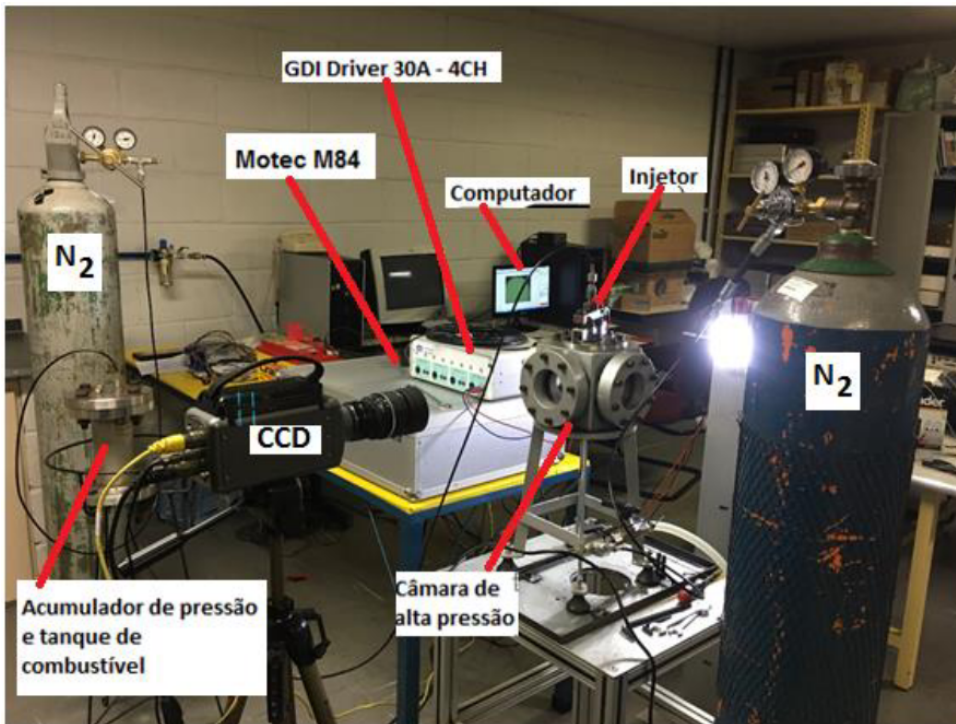
No presente trabalho a simulação do *spray* foi realizada com as propriedades do etanol hidratado, E100, e os resultados foram comparados com os resultados experimentais obtidos com os combustíveis E100 e Exxsol D60, por sua similaridade físico-química com

Tabela 12 – Características do injetor Magneti Marelli (IWD3+ 193)

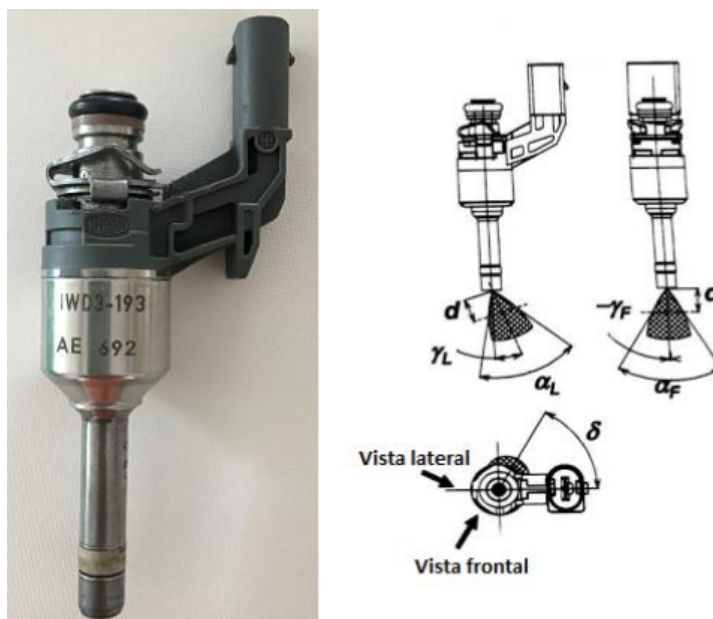
Injetor Magneti Marelli IWD3+ 193	
Tipo de <i>Spray</i>	<i>high-pressure swirl</i>
Número de furos do injetor	1 furo
Pressão nominal de operação	40 a 120 [bar]
Pressão de referência para a vazão estática e dinâmica	100 ± 0,25 [bar]
Vazão estática	12,65 ± 4,0% [g/min]
Vazão Dinâmica ($T_i = 0,6 \pm 0,001ms = inj$)	7,88 ± 5,0 % [mg/inj]
Ângulos de cone nominal (em um plano a 10mm da ponta do injetor)	
Ângulo de cone α	60° ± 5°
Ângulo de desvio γ	0° ± 5°
Ângulo de orientação σ	0° ± 5°

Fonte: Magneti Marelli catálogo - (Júnior, 2017)

Figura 63 – Montagem do aparato experimental



Fonte: adaptado de (Júnior, 2017)

Figura 64 – Injetor high-pressure *swirl* Magneti Marelli IWD3+ 193

Fonte: adaptado do catálogo Magneti Marelli

Tabela 13 – Propriedades dos combustíveis

Propriedade	E100	EA	Exxsol D60	Água
Massa específica [kg/m^3]	791,5	809,3	793,6	998,2
Viscosidade [cP]	0,743	0,743	1,627	1,003
Tensão superficial [N/m]	0,023	0,022	0,025	0,025

Fonte: adaptado de (Júnior, 2017)

o Etanol.

Para determinar o ângulo de cone e a penetração do *spray* são necessárias imagens desde o início até o final da injeção, caracterizando todo o desenvolvimento do mesmo. As imagens foram capturadas utilizando uma câmera CCD (Phantom V7.3; lente Nikkor 105mm f/2d), mostrada na Figura 63.

As características macroscópicas (ângulo de cone e penetração) do *spray* foram determinadas, utilizando filmagens a 8000 quadros por segundo, com a técnica *shadowgraphy* e com auxílio do MatLab para tratamento das imagens. As características microscópicas do *spray* foram medidas com o PDA (*Phase Doppler Anemometry*), para determinar a velocidade média das gotas, o diâmetro das gotas e os diâmetros médios característicos, com ênfase no Diâmetro Médio e Diâmetro Médio de Sauter (SMD) do *spray*.

A.1.1 Shadowgraphie

A técnica *shadowgraph* é frequentemente considerada como um dos métodos mais acessíveis de análise de *sprays*, uma vez que requer poucos recursos para implementação. Tipicamente, a *shadowgraphy* envolve uma fonte de iluminação posicionada atrás de um difusor de luz e uma câmera posicionada opostamente ao plano do difusor, e geralmente o *spray* situa-se entre o difusor e a câmara. As imagens das sombras registradas dependem do redirecionamento da luz devido à refração. A luz que propaga em direção à câmera, longe do difusor, é perturbada (refratada e refletida), devido à alteração do índice de refração do líquido injetado em relação ao ambiente de injeção do *spray*. Assim, apenas os raios de luz não refletidos e refratados preenchem o sensor de imagem. Os raios de luz, desviados pelo *spray*, propagam em outra direção causando uma ausência de luz no sensor de imagem, que é traduzida, em uma parte escura da imagem, ilustrando uma "sombra". Assim, a falta de luz indica a presença do *spray*.

A.1.2 PDA

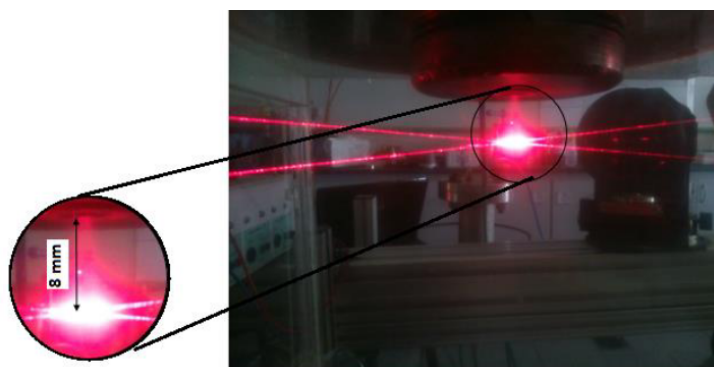
O método PDA (do inglês *Phase Doppler Anemometry*) foi usado para determinar a velocidade e o diâmetro de gotícula do *spray* de etanol e de gasolina usando uma luz

monocromática muito intensa. Ele detecta componentes de velocidade verdadeira (radial e axial) e mede os componentes em uma sequência de amostras quase instantâneas, com alta precisão.

A fonte de luz empregada é um laser *Argon-Ion* (Dantec Dynamics A/S) com potência de saída de até 120 mW. O feixe do laser entra na célula de Bragg e na unidade separadora, onde é dividido dois. A célula de Bragg desloca a frequência de um deles em 80 MHz para evitar a ambiguidade direcional. Uma lente transmissora concentra os dois feixes, que formam o volume de medição em uma distância focal de 300 mm. O volume de medição foi ajustado para o menor tamanho possível para minimizar o risco de divisão de rajada e outros eventos de partículas múltiplas. Uma lente frontal com uma distância focal de 300 mm foi montada na óptica receptora para focar a luz dispersa do volume de medição nos detectores. A sonda receptora foi colocada a 310 mm do volume de medição em um ângulo de 56° . Os sinais de luz detectados passam através de fibras ópticas e atingem a unidade de processamento de sinal onde os fotomultiplicadores transformam os sinais luminosos em sinais de tensão, que podem ser processados.

Considerando a taxa de dados obtida e o chamado *burst efficiency*, o ponto de medição dos experimentos do PDA foi determinado a uma distância de 8 mm da ponta do injetor, como mostrado na Figura 65, e como resultado, a velocidade da gota e o diâmetro das gotas são adquiridos ao mesmo tempo nos mesmos pontos. Para cada teste, foram obtidos dados validados até 2.000 amostras e repetidos cinco vezes para permitir resultados consistentes para análise, totalizando em amostras de velocidade e diâmetros de gotas de 10.000 partículas.

Figura 65 – Distancia da ponta do injetor ao volume de medição do PDA



Fonte: adaptado de (Júnior, 2017)