

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA

AVALIAÇÃO DA SENSIBILIDADE DE MECANISMOS CINÉTICOS
QUÍMICOS REDUZIDOS PARA QUEIMA DE ETANOL/GASOLINA NA
PREDIÇÃO DO FENÔMENO DA DETONAÇÃO EM UM MOTOR DE
COMBUSTÃO INTERNA POR SIMULAÇÕES CFD 3D

RAPHAEL MEIRELES BRAGA

Belo Horizonte,

Julho de 2018

Raphael Meireles Braga

AVALIAÇÃO DA SENSIBILIDADE DE MECANISMOS CINÉTICOS
QUÍMICOS REDUZIDOS PARA QUEIMA DE ETANOL/GASOLINA NA
PREDIÇÃO DO FENÔMENO DA DETONAÇÃO EM UM MOTOR DE
COMBUSTÃO INTERNA POR SIMULAÇÕES CFD 3D

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

Área de concentração: Energia e sustentabilidade

Orientador: Rudolf Huebner

Coorientador: Gustavo de Queiroz Hindi

Belo Horizonte

Escola de Engenharia da UFMG

2018

B813a	<p>Braga, Raphael Meireles. Avaliação da sensibilidade de mecanismos cinéticos químicos reduzidos para queima de etanol/gasolina na predição do fenômeno da detonação em um motor de combustão interna por simulações CFD 3D [manuscrito] / Raphael Meireles Braga. – 2018. 167 f., enc.: il.</p> <p>Orientador: Rudolf Huebner. Coorientador: Gustavo de Queiroz Hindi</p> <p>Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Minas Gerais, Escola de Engenharia.</p> <p>Bibliografia: f. 152-160.</p> <p>1. Engenharia Mecânica - Teses. 2. Motores de combustão interna - Teses. 3. Mecânica dos fluidos - Teses. I. Huebner, Rudolf. II. Hindi, Gustavo de Queiroz. III. Universidade Federal de Minas Gerais. Escola de Engenharia. IV. Título.</p>
	CDU: 621(043)



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

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

"AVALIAÇÃO DA SENSIBILIDADE DE MECANISMOS CINÉTICOS QUÍMICOS REDUZIDOS PARA QUEIMA DE ETANOL/GASOLINA NA PREDIÇÃO DO FENÔMENO DA DETONAÇÃO EM UM MOTOR DE COMBUSTÃO INTERNA POR SIMULAÇÕES CFD 3D"

RAPHAEL MEIRELES BRAGA

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 31 de julho de 2018.

Por:

Prof. Rudolf Huebner

Orientador - Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG

Dr. Gustavo de Queiroz Hindi

Coorientador - Alten Sverige AB - ALTEN SVG - Suécia

Prof. Jose Guilherme Coelho Baeta

Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG

Prof. Fabricio Jose Pacheco Pujatti

Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, eu agradeço a maior das oportunidades que me foi dada que é a vida. Para retribuir e dar sentido a essa jornada, espero sempre poder dar o melhor de mim.

Agradeço também a todos os membros da minha família, aos meus pais, minha irmã e minha esposa, pelos momentos de alegria, pelo suporte e companheirismo. Agradeço sobretudo a minha mãe por todo amor nesses anos de convívio.

Agradeço ao Professor Ramon pela oportunidade de poder realizar e fazer parte de um grupo de pesquisa tão robusto e competente que é o Centro de Tecnologia da Mobilidade da UFMG e por ser um exemplo de líder e empreendedor para todos nós.

Ao meu orientador Professor Rudolf pelo suporte, ensinamentos e ser um exemplo de profissional para mim.

Agradeço especialmente ao meu coorientador Gustavo pelo excepcional suporte e solicitude nesse tempo de projeto, que foram fundamentais para a realização deste trabalho. E, além disso, por ter se tornado um exemplo e eficiência e rigor para mim.

A todos os professores e ex professores do CTM, Pujatti, Baeta e Mautone pela boa vontade e disposição por ensinar.

Aos colegas companheiros de projeto, Gabi, Filipe e Clarissa pelo trabalho juntos, mas principalmente pela união, amizade e descontração mesmo nos momentos de cansaço.

Ao Roberto Schor pela disposição e empenho em rodar os casos para o projeto.

A todos os amigos dos LCFD por fazerem um ambiente de trabalho extrovertido, que com certeza ajuda a equilibrar as elevadas exigências dos trabalhos.

Aos amigos do CTM companheiros de almoço na copa pelos momentos de distração.

Aos colegas Alysson, Nilton e Thiago pelos testes experimentais realizados no motor monocilindro e disposição em esclarecer e discutir qualquer dúvida sobre motores.

A Fiat Chrysler Automobiles, pelo suporte financeiro pela oportunidade de trabalhar em conjunto com uma empresa de alto nível no mercado. Ao programa de residência tecnológica para engenheiros que realizou essa parceria.

Ao Converge Science por fornecer-nos as licenças das simulações e pelo suporte técnico.

SUMÁRIO

Sumário

1 -	INTRODUÇÃO.....	24
1.1 -	Objetivos.....	29
2 -	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	32
2.1 -	Motores de combustão interna.....	32
2.2 -	Processos de combustão em motores.....	37
2.3 -	Variáveis de desempenho e controle de um motor.....	42
2.4 -	Combustão anormal.....	44
2.5 -	Fundamentos da autoignição.....	49
2.6 -	Medidas para controlar o aparecimento da autoignição.....	52
2.6.1 -	Temperatura da carga.....	52
2.6.2 -	Tempo disponível.....	53
2.6.3 -	Composição do combustível.....	54
2.7 -	Tecnologias para aumento de eficiência em motores.....	57
2.7.1 -	<i>Downsizing</i>	57
2.7.2 -	Injeção direta de combustível e estratificação de carga.....	59
2.8 -	Modelos Computacionais.....	62
2.8.1 -	Fase Contínua.....	62
2.8.2 -	Fase Dispersa.....	69
2.8.3 -	Modelagem da combustão.....	84
2.8.4 -	Condições de Contorno.....	87
2.9 -	Trabalhos que utilizaram cinética química em motores de combustão interna.....	91
3 -	METODOLOGIA.....	97
3.1 -	Organização da metodologia.....	98
3.2 -	Validação do modelo de quebra secundária de gota.....	101
3.3 -	Motor monocilindro de pesquisa.....	103
3.4 -	Domínio computacional.....	105

3.5 – Parâmetros de malha.....	107
3.6 – Submodelos utilizados.....	109
3.7 – Condições de contorno e iniciais.....	111
3.8 – Composição dos combustíveis.....	114
3.9 – Configurações de <i>solver</i>	114
3.10 – Configuração de <i>hardware</i>	115
3.11 – Análise de detonação.....	115
3.12 – Dados experimentais para comparação.....	117
4 - RESULTADOS.....	119
4.1 – Validação do modelo de spray em bancada.....	119
4.2 – Modelo de interação das gotas com as paredes.....	125
4.3 – Teste de sensibilidade dos resultados de combustão ao refino de malha.....	128
4.4 – Análise de detonação.....	131
4.4.1 – Casos com avanço de ignição para MBT.....	131
4.4.2 – Casos para com avanço de ignição para detonação forçada.....	134
4.4.3 – Caso extrapolado de detonação com combustível E22.....	144
4.4 – Considerações finais sobre os resultados.....	147
5 - CONCLUSÕES.....	149
6 - SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	151
7 - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	152
ANEXO A – METODOLOGIA QUASIDIMENSIONAL PARA CÁLCULO DE TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR EXPERIMENTAL.....	161

NOMENCLATURA

Letras Latinas

Símbolo	Descrição	Unidade
V_{cc}	Volume da câmara de combustão	m^3
V_t	Volume total	m^3
V_d	Volume deslocado	m^3
r_c	Razão volumétrica de compressão	-
p	Pressão	Pa
u_i	Velocidade na direção i	m/s
S_m	Termo fonte de massa	kg
S_c	Termo fonte de <i>momentum</i>	$kg/m^3.s$
S_e	Termo fonte de energia	$kg/m^2.s^2$
S_s	Termo fonte de turbulência	m^2/s^2
S_t	Termo fonte de dissipação turbulenta	m^2/s^3
A	Área superficial	m^2
S	Entropia	J/K
t	Tempo	s
x_i	Direção genérica i	m
C_μ	Constante do modelo RNG k- ϵ	-
$C_{\epsilon 1}$	Constante do modelo RNG k- ϵ	-
$C_{\epsilon 2}$	Constante do modelo RNG k- ϵ	-
$C_{\epsilon 3}$	Constante do modelo RNG k- ϵ	-
C_s	Constante do modelo RNG k- ϵ	-
H	Entalpia	J
S_m^0	Entropia molar de estado padrão	J/K
H_m^0	Entalpia molar de estado padrão	J
R	Constante do modelo RNG k- ϵ	-
e	Energia interna específica	J/kg
Y_m	Fração mássica da espécie m	-
D_t	Coefficiente de difusão turbulenta	m^2/s
K_t	Conductividade turbulenta	$W/m^2/K$
h_m	Entalpia da espécie ' m '	J

T	Temperatura	K
S_{ij}	Tensor da taxa de deformação média	-
P_i	Pressão no nó i	Pa
dx_{embed}	Tamanho da célula de região do refinamento fixo	m
$embed_scale$	Nível do refinamento	-
dx_base	Tamanho base da malha no domínio	m
V_{inj_teo}	Velocidade de injeção teórica	m/s
Cd_{inj}	Coefficiente de descarga do orifício	-
V_{inj_real}	Velocidade real de injeção	m/s
P_{inj}	Pressão de injeção	bar
A_{inj}	Área de injeção	m ²
C_D	Coefficiente de arrasto	-
We	Número de Webber	-
Re	Número de Reynolds	-
V	Volume da célula	m ³
c	Velocidade do som	m/s
y	Deslocamento adimensional na direção y	-
B_1	Constante do modelo de quebra de gota KH	-
a_{jet}	Raio do jato cilindro	m
a	Constante do polinômio NASA	-
a_{pis}	Metade do curso do pistão	m
B_0	Constante do modelo de quebra de gota KH	-
r	Raio da gota	m
Z	Número de Ohnesorge	-
T	Número de Taylor	-
M_d	Massa da gota	kg
C_τ	Constante de tempo de quebra de gota, modelo RT	-
C_3	Constante de quebra modelo RT	-
C_b	Constante de modelo KHRT	-
L_b	Distância de quebra	m
D	Difusividade mássica do vapor do líquido	m ² /s
B	Número de Spalding	-

Sh	Número de Sherwood	-
Sc	Número de Schmidt	-
D_0	Constante do modelo de difusividade mássica	-
Q	Taxa de condução de calor na superfície	W
M	Peso molecular	kg/kmol
Nu	Número de Nusselt	-
k	Condutividade térmica	W/m.K
Pr	Número de Prantdl	-
F_{drag}	Força de arrasto	N
h	Entalpia	J
E_{crit}^2	Energia crítica do modelo de O'Rourke de filme líquido	-
La	Número de Laplace	-
N	Número de gotas em uma célula	#
M_{coll}	Probabilidade de colisão	-
f_E	Fração de energia dissipada na colisão	-
v	Velocidade da gota	m/s
b	Variável do modelo de colisão	-
b_{crit}	Constante do modelo de colisão	-
X_m	Símbolo químico da espécie m	-
M	Número total de espécies no mecanismo	#
q_r	Variável de taxa de progresso	-
k_{fr}	Coefficiente de taxa das reações elementares direta	-
k_{rr}	Coefficiente de taxa das reações elementares reversa	-
A_r	Fator pré-exponencial (Eq. de Arrhenius)	-
b_r	Expoente de temperatura (Eq. de Arrhenius)	-
E_r	Energia de ativação (Eq. de Arrhenius)	J
k_{cr}	Coefficiente de equilíbrio	-
k_{cr}	Constante de equilíbrio	-
Y	Fração mássica	-
P_{total}	Pressão total ou de estagnação	Pa
$P_{estática}$	Pressão estática	Pa
I	Intensidade turbulenta	-

le	Comprimento de escala	m
u^*	Velocidade adimensional	-
u_τ	Velocidade de fricção	m/s
z_{piston}	Posição do pistão ao longo do eixo do cilindro	m
pin_off	Descentralização do pino do pistão	m
l	Comprimento da biela	m
E0	Gasolina A	-
E100	Etanol hidratado	-
E"n"	Proporção em porcentagem "n" de volume de etanol na gasolina A	-

Letras Gregas

γ	Razão entre calores específicos	-
$\eta_{térmica}$	Eficiência térmica	-
λ	Fator lambda	-
ρ	Massa específica	kg/m ³
σ	Tensor de tensões viscosas, tensão superficial, área de colisão	-, N.m, m ²
τ_{ij}	Tensões de Reynolds	Pa
μ_t	Viscosidade dinâmica turbulenta	N.s/m ²
μ	Viscosidade dinâmica	N.s/m ²
k	Energia cinética turbulenta	m ² /s ²
ε	Dissipação turbulenta	m ² /s ²
Ω	Frequência da onda de crescimento mais rápido	Hz
Λ	Amplitude da onda de crescimento mais rápido	m
η_0	Constante do modelo RNG k- ε	-
β	Constante do modelo RNG k- ε	-
ϕ	Variável genérica do escoamento	-
τ	Escala de tempo	s
n_0	Constante do modelo de difusividade mássica	-
$v'_{m,r}$	Coefficientes estequiométricos dos reagentes	mol
$v''_{m,r}$	Coefficientes estequiométricos dos produtos	mol

$\dot{\omega}_m$	Taxa de produção líquida de cada espécie química	-
κ	Constante de Von Karman	-
θ	Ângulo do eixo do motor	graus

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Consumo médio de combustível em estrada por veículos de passeio movidos a diferentes fontes de propulsão em 2010, 2030 e 2050. Valores de consumo normalizados tendo como base veículos equipados com motores a gasolina naturalmente aspirados.....	25
Figura 1.2 – Integração e parcela responsável de cada trabalho utilizando mecanismos cinético-químicos reduzidos para queima de etanol/gasolina.	30
Figura 2.1 - Geometria básica de um motor alternativo com os pontos de referência: Ponto morto superior (PMS) e ponto morto inferior (PMI).	33
Figura 2.2 – Ciclo Otto ideal: 6-1: admissão a pressão constante; 1-2: compressão isentrópica; 2-3: Introdução de calor à volume constante; 3-4: expansão isentrópica; 4-5exaustão a volume constante e 5-6: exaustão à pressão constante.....	33
Figura 2.3 – Quatro tempos do ciclo dos motores de combustão interna.....	34
Figura 2.4 – Diagrama de pressão em função do ângulo do eixo do motor com a duração real de cada tempo de um típico motor de combustão interna.	35
Figura 2.5 – Comparação do diagrama indicado (pressão x volume) entre o ciclo Otto ideal e real, com as respectivas perdas de trabalho.	36
Figura 2.6 – Fases da centelha elétrica com a respectiva tensão elétrica e quantidade de energia.	38
Figura 2.7 – a) Pressão no cilindro em função do ângulo do motor para diferentes avanços de ignição; b) Torque relativo de eixo em função do avanço de ignição.....	39
Figura 2.8 – Diagrama indicado comparando a perda de trabalho por avanço de ignição atrasado e adiantando em relação ao avanço normal.....	40
Figura 2.9 – a) Condição em que um motor apresentou ponto de máximo torque de eixo sem limitações por detonação, b) condição com MBT e limite de detonação para avanços de ignição superiores ao de MBT e c), condição de MBT limitada pela presença da detonação.....	41
Figura 2.10 – Curva da taxa de liberação de calor em função do ângulo do motor obtida com base na curva de pressão medida e o princípio de conservação de energia em um modelo quase-dimensional.	43
Figura 2.11 – Efeitos da operação contínua em regime de detonação em motores de combustão interna.	45
Figura 2.12 – Três processos de combustão: normal (parte superior), detonação pós-ignição (meio), detonação com pré-ignição (baixo) com os respectivos traços de pressão no cilindro em função do ângulo do motor para cada processo.	47
Figura 2.13 – Comparação da curve de pressão do gás no cilindro e da taxa de liberação de calor de uma combustão normal, detonação convencional (<i>conventional knock</i>) e uma super-detonação (<i>super-knock</i>).	48

Figura 2.14 – Desenho esquemático do processo de ejeção de gota de óleo para a câmara de combustão no tempo que o pistão está com velocidade em direção ao ponto morto superior, porém desacelerado.	49
Figura 2.15 – Traço de pressão de uma auto-ignição de isooctano e ar em uma máquina de compressão rápida. A Figura a) mostra um processo de ignição de dois estágios (primeira estágio no ponto D e segundo estágio no ponto E); a Figura b) mostra um processo de ignição de único estágio no ponto E.	50
Figura 2.16 – Processo básico de oxidação de hidrocarbonetos por Semenov	51
Figura 2.17 – Principais fatores que afetam diretamente a propensão à detonação nos motores de combustão interna	53
Figura 2.18 – Exemplo de compostos a) parafínicos, b) isso-parafínicos e olefínicos.	56
Figura 2.19 – Grupos funcionais dos álcoois, aldeídos e cetonas.	57
Figura 2.20 – Mudança de operação de carga do motor e potência específica causada pela tecnologia downsizing. A linha tracejada representa a região de operação de um motor naturalmente aspirado de 2,0 litros e a linha contínua de um motor turboalimentado de 1,2 litros.	58
Figura 2.21 – Tempo de permanência em regiões do mapa de pressão média efetiva e velocidade de rotação do eixo do motor para diferentes trajetos e tipos de direção de um veículo com a tecnologia downsizing. A área hachurada representa a região em que o motor apresenta detonação.	59
Figura 2.22 – Desenho esquemático do modelo de a) injeção no duto de admissão (<i>port fuel injection, PFI</i>) e b) injeção direta de combustível na câmara de combustão.	59
Figura 2.23 – Diferentes tipos de bocais injetores de combustível com os respectivos padrões de spray formados para duas condições de contra pressão 1,2 bar e 5,6 bar.	61
Figura 2.24 – Domínio simplificado contendo três células para exemplo de cálculo de termo convectivo.	66
Figura 2.25 – Processos sofridos pela injeção de um jato líquido por um orifício: formação do spray, quebra primária das gotas, colisão e coalescência de gotas, evaporação de gotas, quebra secundária e contato com a parede. Definição esquemática de penetração do spray e ângulo de cone.	70
Figura 2.26 - a) Analogia do modelo de quebra de Taylor Breakup model (TAB) com um sistema massa mola; b) Definição do deslocamento adimensional ‘y’ ao longo de um eixo da gota: quando y=0 tem-se a geometria esférica da gota e quando y=1, a do disco.....	72
Figura 2.27 – Desenho esquemático do crescimento das instabilidades de Kelvin-Helmholtz na superfície de um jato líquido penetrando um ambiente gasoso.....	73
Figura 2.28 – Ilustração do processo de quebra segundo o modelo de Rayleigh-Taylor. As instabilidades na superfície da gota começam a crescer devido à aceleração normal da gota líquida em outro fluido com massa específica diferente.	74

Figura 2.29 – Processos de quebra combinados dos modelo KH-RT: crescimento de instabilidades do modelo KH: cisalhamento entre os fluidos; RT: aceleração normal entre fluidos com diferentes massas específicas.	76
Figura 2.30 – Definição do comprimento L_b para ativação do modelo RT no modelo combinado KH-RT.....	77
Figura 2.31 – Modelo esquemático representando os possíveis processos no modelo de Kuhnke, com base na temperatura adimensional T^* (Relação entra a temperatura da parede e a temperatura de ebulição do líquido) e no valor de K	81
Figura 2.32 – Diferentes processos sofridos por uma gota no modelo de Bai e Gosman de acordo com a temperatura adimensional da parede e número de Webber da gota.	82
Figura 3.1 – Spray de combustível atingindo as válvulas de admissão em casos que a injeção é feita com as válvulas abertas.	99
Figura 3.2 – Resumo de cada caso simulado com o objetivo principal.	101
Figura 3.3 – Motor monocilindro de pesquisa (<i>SCRE engine</i>).....	104
Figura 3.4 – Tipos de pistão utilizados nos testes experimentais e nas simulações 3D: a) Pistão com características de injeção indireta (PFI) utilizado nos testes experimentais da Categoria 1 e b) pistão com características de injeção direta utilizado nos testes experimentais da Categoria 2.	104
Figura 3.5 – Curvas de abertura e fechamento das válvulas de admissão e exaustão do motor. As curvas com pontos representam as medições feitas pela equipe de experimentações e as curvas contínuas a interpolação obtida pelo programa GT-Power no trabalho de VAZ, 2018.	105
Figura 3.6 – Geometria 3D do motor monocilindro.....	106
Figura 3.7 – Volume interno sobreposto com a geometria do motor e volume interno extraído.....	106
Figura 3.8 – Imagem ilustrativa de uma malha utilizada para os cálculo numéricos com os respectivos refinamentos e o tamanho da malha resultante em cada região.	108
Figura 3.9 – Detalhe no entorno da vela de ignição em um instante durante a combustão evidenciando o refinamento adaptativo baseado em temperatura para as quatro malhas utilizadas no teste de convergência de malha.	108
Figura 3.10 – Ponto de monitoramento de pressão, temperatura, velocidade e massa de radicais distribuídos ao longo do cilindro 1,0 mm abaixo da face do cabeçote do motor.	116
Figura 3.11 – Metodologia para cálculo dos índices de detonação MAPO e IMPO.....	117
Figura 4.1 – a) Número total de células em função do tempo para as malhas simuladas; variação do resultado de combustível evaporado (b), penetração do spray (c) e SMD (d) para as quatro malhas testas.....	121
Figura 4.2 – Malhas e configuração final do spray na vista lateral e inferior para as quatro malhas utilizadas M1 (2,0 mm), M2 (1,0 mm), M3 (0,5 mm) e M4 (0,125 mm).	122
Figura 4.3 – Influência na curva de penetração do spray e diâmetro médio de Sauter (SMD) da constante a) B1 do modelo KH; b) C3 do modelo RT; c) C_b do modelo combinado KH-RT.	123

Figura 4.4 – Comparação qualitativa dos resultados da simulação com modelo ajustado de quebra de gotas KH-RT com imagens experimentais do spray pela técnica de <i>shadowgraph</i>	124
Figura 4.5 – Comparação dos resultados de pressão e taxa de liberação de calor no cilindro para a simulação 3D do motor com mecanismo cinético-químico de Rohl e o modelo de quebra de gotas ajustado e para os dados experimentais.....	125
Figura 4.6 – Comparação da curva de pressão no cilindro entre os modelos de formação de filme líquido de O' Rourke, Bai-Gosman e Kuhnke com a curva de pressão obtida experimentalmente....	126
Figura 4.7 – Comparação entre os modelos de O' Rourke, Bai-Gosman e Kuhnke na massa acumulada de combustível na forma de filme líquido, massa das parcelas que atingem as válvulas de admissão e diâmetro médio de Sauter.....	127
Figura 4.8 – Massa de combustível em forma de líquido na região do cilindro para os três modelos de formação de filme líquido testados.	127
Figura 4.9 – Imagens da frente de chama sobreposta com a malha utilizada em cada uma das quatro malhas testadas no instante de -10° do eixo do motor.	128
Figura 4.10 – Curva de temperatura do gás ao longo da linha partindo da região de gases não queimados até a região de gases queimados, cortando a frente de chama para as quatro malhas avaliadas.....	130
Figura 4.11 – Curvas de pressão no cilindro e taxa de liberação de calor durante o intervalo de combustão para as malhas avaliadas. A malha mais fina, com AMR 5, divergiu por volta de -5° do eixo do motor.	130
Figura 4.12 – Valores de quantidade de processadores vezes horas de simulação para as três malhas que completaram a simulação. O tempo real de simulação para cada malha é mostrado na caixa acima de cada barra no gráfico.	130
Figura 4.13 – Curvas de pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do motor para os três mecanismo testados em conjunto com a curva de pressão medida experimentalmente para o caso com avanço para máximo torque de eixo.....	131
Figura 4.14 – Curvas de taxa de liberação de calor em função do ângulo do eixo do motor para os três mecanismo testados em conjunto com a curva calculada com base na pressão experimental e um modelo quasi-dimensional para o caso com avanço para máximo torque de eixo.....	132
Figura 4.15 – Curvas de pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do motor para os três mecanismo testados em conjunto com a curva de pressão medida experimentalmente para o caso com avanço para detonação forçada.	134
Figura 4.16 - Curvas de taxa de liberação de calor em função do ângulo do eixo do motor para os três mecanismo testados em conjunto com as curva calculada com o modelo quasidimensional e os dados experimentais para o caso de LD (condições médias de 200 ciclos) e para os ciclos individuais com avanço para detonação forçada.	135

Figura 4.17 – Pressão média no cilindro e pressão nos pontos de monitoramento de número 10, 20, 30 e 40 para a simulação com mecanismo de 75 espécies e avanço de ignição condicionado para detonação forçada. As oscilações de pressão não são vistas na pressão média do cilindro, mas são evidentes nos pontos de monitoramento.	136
Figura 4.18 – Posição no cilindro dos pontos de monitoramento os quais resultaram nos maiores valores de MAPO para cada mecanismo cinético químico testado.....	137
Figura 4.19 – Flutuações filtradas de pressão em função do ângulo do motor para os três mecanismos cinético químicos testados.....	139
Figura 4.20 – Esforço computacional contabilizado pelo valor de número de processadores vezes o tempo de simulação em horas para simular um ciclo completo com detonação com os três mecanismos cinético químicos testados nesse trabalho, juntamente com o tempo total real para completar cada ciclo.....	140
Figura 4.21 – Plano de concentração do radical CH_2O em conjunto com um iso-volume de temperatura na faixa de 1200 e 1400 K para indicar aparecimento de outra frente de combustão.	141
Figura 4.22 - Plano de concentração do radical H_2O_2 em conjunto com um iso-volume de temperatura na faixa de 1200 e 1400 K para indicar aparecimento de outra frente de combustão.	142
Figura 4.23 – Iso-volume do radical CH_2O com concentração maior que 0,005 em cor amarela em conjunto com um iso-volume do radical OH maior que 0,003 para indicar frente de chama para os mecanismos de 66E e 75E.....	143
Figura 4.24 - Iso-volume do radical H_2O_2 com concentração maior que 0,005 em cor amarela em conjunto com um iso-volume do radical OH maior que 0,003 para indicar frente de chama para os mecanismos de 66E e 75E.....	143
Figura 4.25 – Curva de pressão no cilindro para o caso do motor operando com gasolina E22, 3000 rpm, 6 bar BMEP e avanço de ignição para MBT para a simulação com mecanismo de 75 espécies e a curva média experimental.	144
Figura 4.26 - Curva de taxa de liberação de calor para o caso do motor operando com gasolina E22, 3000 rpm, 6 bar BMEP e avanço de ignição para MBT para a simulação com mecanismo de 75 espécies e a curva média calculada com dados experimentais e modelo quase-dimensional.	144
Figura 4.27 – Curvas de pressão no cilindro para o caso do motor operando com gasolina E22, 3000 rpm, 6 bar BMEP para a simulação com mecanismo de 75 espécies com avanço de ignição para a condição de limite inferior de detonação e a curva média experimental assim como uma curva individual de um ciclo detonante desta condição.....	146
Figura 4.28 - Curvas de taxa de liberação de calor para o caso do motor operando com gasolina E22, 3000 rpm, 6 bar BMEP para a simulação com mecanismo de 75 espécies com avanço de ignição para a condição de limite inferior de detonação e a curva média, assim como uma curva individual experimental de um ciclo detonante desta condição calculadas com dados experimentais e modelo quase-dimensional.....	146

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Trabalhos envolvendo simulação 3D de motores de combustão interna com mecanismos cinético-químicos.....	96
Tabela 3.1 – Principais dimensões do motor monocilindro de pesquisa utilizado nesse trabalho.	103
Tabela 3.2 – Mecanismos de cinética química utilizados nas simulações 3D nesse trabalho para oxidação dos combustíveis.	111
Tabela 3.3 – Condição de contorno de temperatura nas paredes do motor.	112
Tabela 3.4 – Principais dados de entrada que foram utilizados nas simulações	113
Tabela 3.5 – Fração mássica de cada espécie componente dos combustíveis obtidas no trabalho de COTA, 2018.	114
Tabela 4.1 – Massa de ar aprisionada no cilindro e fator lambda global calculado para as três simulações, para o caso do experimento e da simulação 1D feita no GT-Power no trabalho de VAZ, 2018, para os combustíveis E10 e E22, rotação de 3000 rpm e 6 bar de BMEP.	133
Tabela 4.2 – Máxima amplitude das oscilações de pressão filtrada (MAPO) em bar para quatro pontos de monitoramento e máximo no cilindro para as três simulações com os diferentes mecanismos cinético químicos, e para os três ciclos experimentais que apresentaram traços de detonação.	137
Tabela 4.3 – Integral das oscilações da curva de pressão filtrada e retificada (IMPO) em bar para quatro pontos de monitoramento e a máxima no cilindro para as três simulações com os diferentes mecanismos cinético químicos, e para os três ciclos experimentais que apresentaram traços de detonação.	137
Tabela 4.4 – Índices de detonação para o ciclo individual com detonação e para três pontos de monitoração da simulação com mecanismo de 75 espécies para o caso com avanço de ignição para limite inferior de detonação.	147

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

MCI	Motores de Combustão Interna
OICA	Organização Internacional dos Produtores de Veículos Automotivos
EIA	Agência Internacional de Energia
EPA	Agência de Proteção Ambiental
MIT	Instituto Tecnológico de Massachusetts
EPE	Empresa de Pesquisa Energética
VE	Veículos Elétricos
0-D	Zero Dimensional
1-D	Uni Dimensional
3-D	Tri Dimensional
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
FCA	Fiat Chrysler Automobiles
CTM-UFMG	Centro de Tecnologia da Mobilidade da Universidade Federal de Minas Gerais
KH-RT	Kelvin-Helmholtz/Rayleigh-Taylor
PMS	Ponto Morto Superior
PMI	Ponto Morto Inferior
PFI	<i>Port Fuel Injection</i>
MBT	<i>Maximum Brake Torque</i>
PME	Pressão Média Efetiva
MEP	<i>Mean Effective Pressure</i>
IMEP	<i>Indicatedmean Effective Pressure</i>
BMEP	<i>Brake Mean Effective Pressure</i>
ON	<i>Octane Number</i>
NO _x	Óxidos Nitrosos
SMD	<i>Sauter Mean Diameter</i>
PISO	<i>Pressure-Implicit with Splitting Of Operators</i>
RNG	<i>Renormalization Group</i>
MVF	Método dos Volumes Finitos
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
AMR	<i>Adaptive Mesh Refinement</i>

TAB	Taylor Analogy Breakup
LID	Limite Inferior de Detonação
LD	Limite de Detonação
SOR	<i>Successive Over-Relaxation</i>
MAPO	<i>Maximum Amplitude Pressure Oscillations</i>
IMPO	Integral do MAPO na Janela de Análise

RESUMO

Com o aumento das restrições das emissões de gases poluentes provenientes da combustão de combustíveis fósseis, a tecnologia *downsizing* nos motores de combustão interna tem se tornado quase mandatória. Com os motores trabalhando em regimes de operação com elevadas relações volumétricas de compressão e elevadas cargas e temperaturas, o fenômeno da detonação se torna preocupante, uma vez que limita a eficiência e pode causar danos ao motor. As simulações computacionais se tornaram uma etapa imprescindível no desenvolvimento de novos conceitos de motores, uma vez que elas permitem um melhor entendimento dos fenômenos que ocorrem na câmara de combustão. Nesse intuito, o presente trabalho apresenta uma comparação de diferentes mecanismos cinético-químicos reduzidos para oxidação de misturas de gasolina e etanol quanto à sua capacidade de caracterizar o fenômeno da detonação em um motor monocilíndrico de pesquisa de ignição por centelha, visando aplicação no mercado nacional. Para isso, é apresentada uma metodologia para simulações tridimensionais do escoamento, injeção de combustível e combustão em motores de combustão interna de injeção direta de combustível. Dessa forma, uma validação do modelo de quebra secundária de gotas é feita através de simulações de injeções spray de combustível em câmara quiescente e sua validação no modelo 3D do motor operando com etanol é apresentada. Uma análise de sensibilidade dos resultados de combustão ao modelo de interação do spray com as paredes é feita, sendo que o modelo de O'Rourke apresentou resultados mais próximos dos experimentais. Com os modelos de spray caracterizados, três mecanismos de cinética química (um com 66, outro com 75 e outro com 115 espécies químicas) são comparados para a simulação de um caso com o motor operando a 3000 rpm, 6 bar de pressão média efetiva de eixo e combustível E10, tanto para a condição de avanço de ignição para máximo torque de eixo (MBT), quanto para uma condição de avanço para detonação forçada. Os três mecanismos cinético-químicos avaliados não se mostraram adequados para análise de detonação, uma vez que para os casos de MBT os mecanismos apresentaram indícios de detonação e para os casos de detonação forçada os índices de detonação foram cerca de vinte vezes os valores experimentais. Embora os mecanismos tenham mostrado uma reatividade elevada com o combustível E10, o mecanismo que mais se aproximou dos resultados experimentais foi o de 75 espécies. Ao ser utilizado em outro caso do motor com gasolina E22, esse mecanismo apresentou resultados muito mais coerentes com os dados experimentais, tanto para a condição de MBT quanto para a condição de detonação.

Palavras-chave: *Motores de Combustão Interna; Dinâmica dos Fluidos Computacional; Detonação em Motores; Misturas Etanol-Gasolina; Injeção Direta de Combustível; Mecanismos Cinético-químicos reduzidos.*

ABSTRACT

With the increasing of pollutant emission restrictions by fossil fuel burning, the downsizing technology has become mandatory in modern internal combustion engines. However, keeping the engine operating at a high compression ratio, load and temperatures comes together with knocking issues. The computational fluid dynamics is a powerful tool that allows a better understanding of the phenomena that take place in the combustion chamber and it is an essential phase in the engine development process. In this context, the present dissertation presents a comparison of the capacity to characterize the knock phenomenon in a single cylinder spark ignition engine with different reduced chemical kinetics mechanisms for ethanol-gasoline blends oxidation. Therefore, a methodology for 3D numerical simulation of direct injection internal combustion engine is presented. Thus, a calibration and validation of KH-RT break up model constant is made by means of quiescent spray vessel simulations. In addition, the sensibility of combustion results in relation of the wall liquid film formation model is assessed for gasoline E27 as fuel and three models are used: O'Rourke, Bai-Gosman and Kuhnke. With the validated spray models, three chemical kinetic models (66, 75 and 115 species) are evaluated in an engine simulation with the engine velocity of 3000 rpm, 6 bar of break mean effective pressure and E10 as fuel both for maximum brake torque (MBT) spark time and for knock border spark timing condition. Knock indexes are calculated for each mechanism and compared with experimental values and the results show that none of the mechanism was able to correctly characterize knock in the engine, since maximum amplitude of pressure oscillations were roughly ten times the experimental value. Moreover, for the MBT case (non-knocking condition) the mechanisms predicted a slight trace of knock, which is not seen in the experimental test. At last the 75 species model is implemented in an engine case with a different fuel blend (gasoline E22) and presented much more satisfactory results.

Keywords: *Internal Combustion Engines; Computational Fluid Dynamics; Engine Knock; Ethanol-Gasoline Blends; Direct Injection Engines; Reduced chemical kinetic mechanisms;*

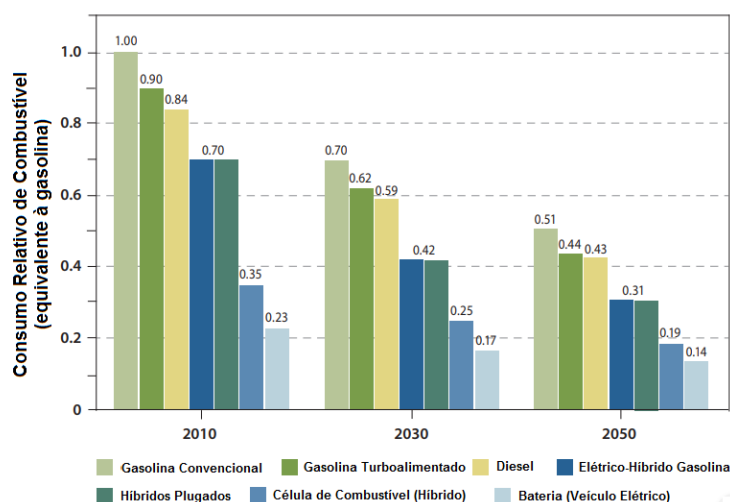
1 - INTRODUÇÃO

Os motores de combustão interna (MCI) são máquinas térmicas que convertem energia química de um combustível em energia térmica, que, por sua vez, é utilizada para gerar trabalho útil (GANESAN, 1995). Devido a sua simplicidade, robustez e baixa relação peso/potência, os MCI são amplamente utilizados para transporte e geração de energia (HEYWOOD 1988). Segundo dados da Organização Internacional dos Produtores de Veículos Automotivos (OICA), em 2015, a frota veicular no mundo foi por volta de 1,2 bilhões. A maioria desses veículos utiliza combustíveis líquidos derivados do petróleo, que por sua vez é um recurso natural não renovável. Se o consumo atual for mantido, as reservas de petróleo possuem estimativa de duração de 40 a 45 anos segundo a Agência Internacional de Energia (EIA, 2013). Além disso, no cenário atual mundial, a preocupação com a poluição atmosférica está cada vez mais em destaque. O aquecimento global é atribuído ao aumento constante das emissões de gases como o dióxido de carbono (CO_2), metano (CH_4), óxidos de nitrogênio dentre outros, chamados de gases causadores do efeito estufa (NASA, 1998) na atmosfera e sendo o CO_2 o mais significativo deles (KRUPA, 1997, EPA, 2015). Segundo dados da Agência de Proteção Ambiental (Environmental Protection Agency, 2017), em 2015, 82% da energia consumida nos Estados Unidos da América foram provenientes de combustível fóssil, com o setor de transporte sendo o maior responsável por esse consumo e o maior emissor de CO_2 , representando 34,4% de todo CO_2 produzido no ano. A emissão de CO_2 pelos veículos movidos a motores de combustão interna está diretamente relacionada com o consumo de combustível.

Tendo em vista a redução de emissões de poluentes, o governo Alemão anunciou no ano retrasado (2016) que até 2030 irá proibir a venda de automóveis novos equipados com motores de combustão interna e outros governos, como o da França e do Reino Unido, também apresentaram propostas semelhantes para o ano de 2040. Para atender a esse propósito, o motor elétrico é um forte candidato para substituir o motor de combustão interna. Embora possa parecer que os MCI estejam com os dias contados, a realidade atual no cenário global é outra. Tomando como exemplo ainda os Estados Unidos da América, no ano de 2016, 64,2% do total de energia elétrica gerada foram provenientes da queima de gás natural e carvão (EIA, 2017) (que também são combustíveis não renováveis e fontes potenciais de emissão de CO_2), o que fez com que o setor de produção de eletricidade superasse o setor de

transporte no quesito emissões de CO₂. Segundo ainda os dados da EIA 2017, a parcela de energia elétrica proveniente da energia nuclear foi 19,7% e a parcela proveniente de fontes renováveis como hidroelétricas, turbinas eólicas, biomassa e solar foi 14,9%. Esses dados alertam que a fonte de produção de eletricidade para os veículos elétricos também deve ser independente de combustível fóssil para efetivamente ter supressão de emissões de CO₂. Além disso, para uma análise mais abrangente da viabilidade dos veículos elétricos, deve se analisar o ciclo de vida de emissões de CO₂ também durante a fase de produção dos veículos elétricos. Quiao e seus colaboradores (QUIAO *et al.*, 2017) apresentaram um estudo comparativo do total de CO₂ emitido durante a fase de produção dos veículos de combustão interna convencional com os veículos elétricos na China. Segundo os autores, os veículos elétricos geram 60% a mais de CO₂ na fase de produção do veículo, que é devido principalmente à produção das baterias e do motor elétrico. Segundo o relatório “*On the road toward 2050*” de 2016, publicado pelo Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT, 2016), dentre as opções atuais, os motores de combustão interna são os que mais tem potencial para redução de emissão de gases causadores do efeito estufa em curto prazo. Conforme é mostrado na Figura 1.1, estima-se que em 2050 os motores a gasolina turbo-alimentados consumirão 56% a menos de combustível do que os motores naturalmente aspirados consomem atualmente e os veículos elétricos híbridos, 69 %. Ainda segundo o relatório, a projeção é que em 2050, 60% de veículos vendidos ainda serão incorporados com motores de combustão interna (porém mais tecnológicos e menos poluentes).

Figura 1.1 – Consumo médio de combustível em estrada por veículos de passeio movidos a diferentes fontes de propulsão em 2010, 2030 e 2050. Valores de consumo normalizados tendo como base veículos equipados com motores a gasolina naturalmente aspirados.



Fonte: “On the Road toward 2050”, MIT, 2015

No cenário Brasileiro, de acordo com o plano decenal de expansão de energia (EPE 2026, 2017), da Empresa de Pesquisa Energética (EPE), há aspectos que sugerem uma transição ainda mais tardia na indústria automotiva na adoção de veículos elétricos (VE). Entre eles são citados: o elevado custo venda dos VE; mesmo com uma ampla cobertura da rede elétrica no país, uma série de adaptações e aperfeiçoamentos da infraestrutura de abastecimento para VE e de descarte e reciclagem de baterias; e poucos incentivos governamentais para disseminação da tecnologia elétrica. A EPE projeta que a frota nacional de veículos leves permanecerá constituída essencialmente de veículos com motores a combustão interna de ignição por centelha com a participação dos veículos híbridos menor que 1%.

Levando em consideração a elevada contribuição com a poluição atmosféricas que os motores de combustão interna propiciam, em contradição com a permanência dos motores durante as próximas décadas, é evidente a necessidade de desenvolver novas tecnologias que aumente sua eficiência de conversão de combustível, reduzindo consumo de combustível e produção de dióxido de carbono. A introdução dos motores com tecnologia multicomcombustível (*flex fuel*) no mercado automotivo possibilitou uma maior versatilidade na escolha do tipo de combustível a fim de contornar as variações constantes do preço do petróleo e da taxa do dólar, que impactam diretamente no preço final da gasolina ou da demanda álcool/açúcar no mercado (BAËTA, 2006). No caso do Brasil, o etanol já é incorporado na gasolina comercial, atualmente com 27% em volume, com a finalidade de agente anti-detonante, redução de importação de petróleo e melhoria da limpeza de fuligem que a queima da gasolina gera na câmara de combustão. A tecnologia multicomcombustível, no entanto, permite que o motor funcione com qualquer proporção de álcool e gasolina misturados.

Em se tratando de motores de combustão interna, um fator extremamente prejudicial para os componentes do motor e um limitante da eficiência do mesmo é a ocorrência do fenômeno chamado de detonação (a nomenclatura e seus fundamentos serão discutidos posteriormente no capítulo da Revisão Bibliográfica). Ela limita a relação volumétrica de compressão do motor, que é diretamente relacionada com a eficiência de conversão de combustível, e também pode limitar o avanço de ignição do motor, que muitas vezes não consegue ser calibrado para o ponto de máximo torque. Portanto, um bom entendimento do fenômeno da detonação é fundamental para explorar os limites de eficiências dos motores de combustão interna.

No âmbito de projeto motores de combustão interna, as simulações computacionais se tornaram parte indispensável durante o processo. Para os projetistas elas oferecem uma possibilidade de explorar os limites de seu projeto ainda durante a etapa conceitual; para os engenheiros de teste são utilizadas para detectar problemas e ajudar a propor soluções; os gerentes apreciam a redução do risco técnico, tempo e investimento em um novo lançamento (bancadas de teste de motores são mais caras que estações de trabalho); e por fim, redução no orçamento de desenvolvimento e subsequente redução de custo na fabricação (CHIODI, 2010).

Segundo Heywood (HEYWOOD, 1988), as simulações podem ser classificadas em termodinâmicas ou fluidodinâmicas de acordo com os tipos de equações resolvidas predominantemente pelo modelo. Dentro dos modelos termodinâmicos estão: os modelos 0-D, que são baseados na conservação de massa e energia pela primeira lei da termodinâmica sem resolução espacial; os fenomenológicos que possuem detalhes adicionais além da conservação de energia introduzidos para cada fenômeno em turnos); e os quasi-dimensionais que envolvem o tempo e uma dimensão axial como variáveis independentes e também contam com a introdução de características geométricas específicas em conjunto com uma série de modelos semi-empíricos como de turbulência, de chama turbulenta, etc.) (HEYWOOD, 1988, BARROS, 2003, MEDINA, 2014). Exemplos desses tipos de simulações termodinâmicas que compõem parte desse trabalho (direta ou indiretamente) são: simulações 0-D para cálculo de atraso de ignição de diferentes mecanismos cinéticos químicos utilizando a ferramenta “*chemistry*” do programa comercial CONVERGE CFD; simulações 1-D para determinar a velocidade de chama laminar de mecanismos também utilizando o CONVERGE CFD, simulações quasi-dimensionais 1-D utilizando o programa comercial GT-Power.

Modelos fluidodinâmicos, conhecidos também como modelos de fluidodinâmica computacional (ou da sigla em inglês CFD: *Computational Fluid Dynamics*), são inerentemente multi-dimensionais (2D ou 3D), os quais são baseados na conservação de massa, espécies químicas, momentum e energia em toda região do motor (MEDINA, 2014). Neste trabalho, é utilizado o CONVERGE CFD para realizar as simulações tridimensionais de um motor de combustão interna.

Apesar dos indiscutíveis benefícios que as simulações podem trazer, é importante enfatizar que elas também são custosas. Existe um custo mínimo para aquisição de computadores

(*cluster*), com requisitos para simulações CFD e também de licenças de programas comerciais. Além disso, existe também o custo de treinamento e de contratação de mão de obra especializada e o custo para manter um cluster funcionando por tempo gasto de simulação. Dessa forma, qualquer redução de tempo computacional e quantidade de simulações é sempre desejável.

As simulações 3D de motores de combustão interna possuem uma série de fenômenos complexos que demandam ainda mais computacionalmente, como por exemplo, a natureza turbulenta do escoamento, a presença de duas fases: líquido e gás (simulação de spray de combustível, por exemplo), movimento de fronteiras (pistão e válvulas) e a combustão. Atualmente a combustão pode ser abordada utilizando modelos de equilíbrio químico (como por exemplo, os modelos CFM, ECFM-3Z, G-equation, RIF model, dentre outros), que quase sempre necessitam de dados experimentais para calibração, ou com modelos que utilizam cinética química detalhada. A necessidade de ajuste dos modelos de equilíbrio químico reduz o caráter preditivo das simulações, além disso, o ajuste das variáveis infelizmente pode ser utilizado para contornar condições iniciais ou de contorno ruins (POMRANING, 2016). Já os modelos de combustão baseados em cinética química são complexos uma vez que a química da combustão depende do tipo de combustível utilizado. A gasolina, por exemplo, é uma mistura de vários hidrocarbonetos manufaturados do petróleo. Um teste de uma amostra de petróleo pode identificar mais de 25 mil tipos diferentes de hidrocarbonetos (PULKRABEK, 1997). Modelos para as reações das etapas de oxidação para hidrocarbonetos do tipo parafinas, um componente muito presente nas gasolinas, podem incluir pelo menos 200 reações diferentes (FERGUSON, 2001). Por exemplo, um mecanismo cinético químico detalhado para gasolina, apresentado por MEHL (2011), possui 5930 reações e 1389 espécies químicas. Até mesmo mecanismos para combustíveis mais simples como o etanol (C_2H_6O) podem conter várias reações, como é o caso do mecanismo proposto por MARINOV (1998), com 351 reações e 56 espécies. Em sistemas como os motores de combustão interna, a solução simultânea de equações de conservação transiente e tridimensionais para os campos de velocidade, pressão, temperatura e as concentrações de inúmeras espécies torna-se uma tarefa formidável, sendo que uma única simulação pode levar muitos dias para ser resolvida. Dessa forma, a redução de mecanismos cinético-químicos é extremamente desejável, de modo que o mecanismo projetado possa capturar os aspectos de maior interesse do pesquisador sem envolver detalhes desnecessários (TURNS, 2013). É nesse contexto que o presente trabalho se encontra, no intuito de validar mecanismos cinético-químicos reduzidos que possam ser

utilizados em simulações 3D de motores e consigam caracterizar o fenômeno da detonação em motores trabalhando com diferentes parcelas de etanol e gasolina como combustível (visando a aplicação no mercado brasileiro com os motores multicomcombustíveis).

É importante esclarecer para o leitor, que a pesquisa apresentada neste documento é uma etapa de um projeto mais abrangente, desenvolvido no Centro de Tecnologia da Mobilidade da Universidade federal de Minas Gerais (CTM-UFMG) em parceria com a Fiat Chrysler Automobiles (FCA) pelo programa denominado de Residência Tecnológica para Engenheiros. Para maior entendimento deste documento e da pesquisa apresentada aqui, recomenda-se também a leitura das dissertações de COTA, 2018, VAZ, 2018 E MARTINS, 2018 em conjunto com esta, uma vez que elas compõem um projeto integrado. O projeto completo tem como objetivo desenvolver, testar e validar mecanismos cinético-químicos com diferentes níveis de redução para diferentes misturas de gasolina e etanol visando a caracterização de parâmetros globais de eficiência, predição de detonação e de emissão de poluentes em um motor monocilíndrico de pesquisa, de forma que o pesquisador interessado possa escolher qual mecanismo utilizar de acordo com seu interesse e recurso computacional disponível. A parcela da pesquisa que cada trabalho foi responsável pode ser vista no fluxograma apresentado Figura 1.2.

1.1 – Objetivos

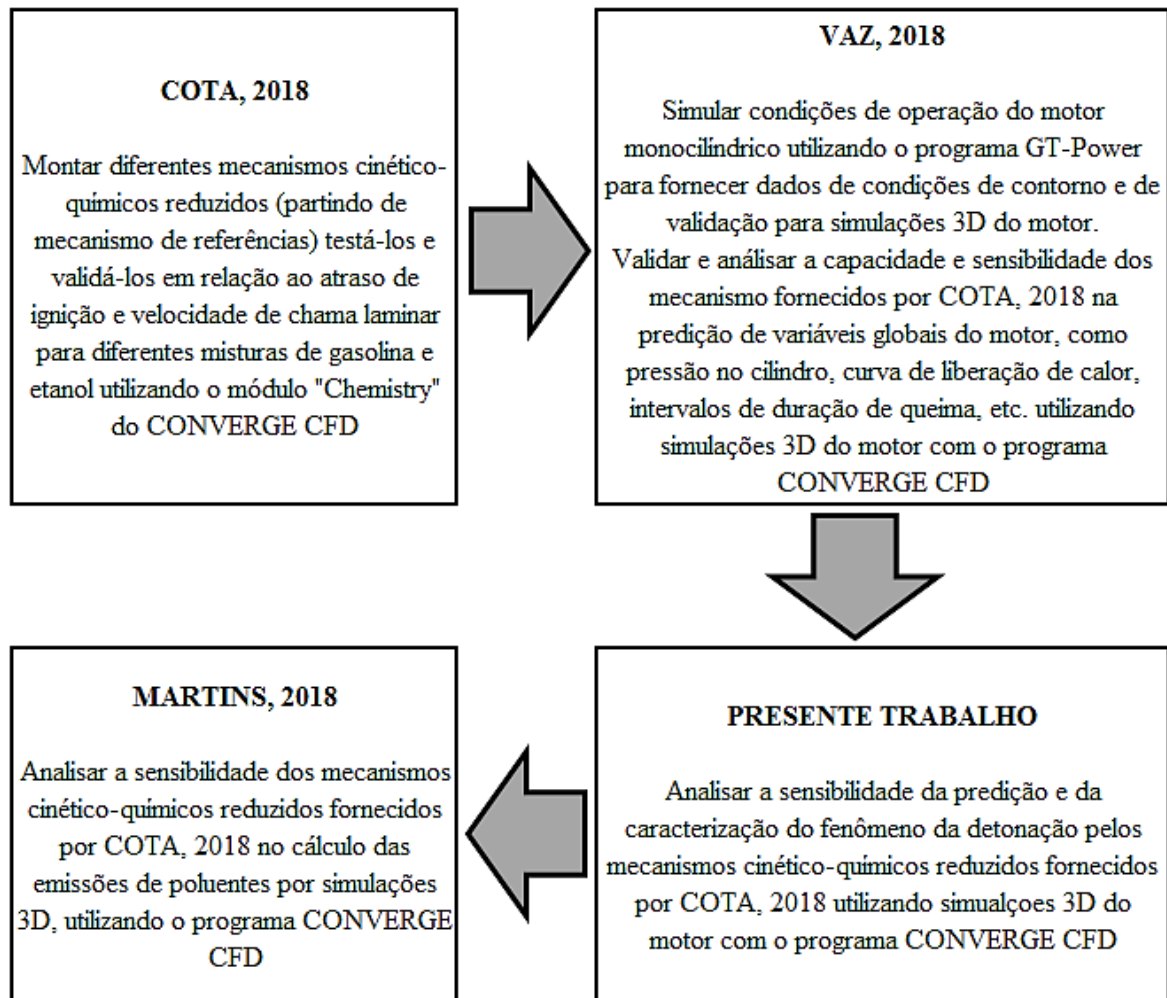
O objetivo desse trabalho é avaliar, por meio de simulações numéricas tridimensionais, diferentes mecanismos cinético-químicos reduzidos quanto à sua sensibilidade na predição do fenômeno da detonação e habilidade de caracterizar corretamente a detonação, para diferentes composições de etanol e gasolina como combustível em um motor de combustão interna monocilíndrico de pesquisa de ignição por centelha.

Para alcançar este objetivo geral, foram definidos alguns objetivos específicos:

- Calibração das constantes do modelo de quebra secundária de gotas (híbrido Kelvin-Helmholtz/Rayleigh-Taylor) por simulações de spray em câmara quiescente;
- Validação do modelo de spray calibrado aplicado em um caso 3D do motor monocilindro com um mecanismo cinético-químico de referência da literatura;
- Teste de sensibilidade dos resultados de combustão ao modelo de interação das gotas com as paredes do motor;

- Teste de sensibilidade dos resultados de combustão ao refino de malha;
- Avaliação de diferentes mecanismos cinético-químicos na predição de detonação por meio de simulações 3D do motor monocilindro de pesquisa.

Figura 1.2 – Integração e parcela responsável de cada trabalho utilizando mecanismos cinético-químicos reduzidos para queima de etanol/gasolina.



Fonte: autor

Esse documento foi dividido nos seguintes capítulos: 1 - Introdução, abordando os assuntos introdutórios e os objetivos da pesquisa; 2 - Revisão Bibliográfica, no qual é feita uma revisão teórica dos ciclos de operação ideal e real de um motor de ignição por centelha, tipos de combustão e relação do combustível com a detonação, algumas tecnologias atuais para aumento de eficiência de conversão de combustível do motor e modelagem numérica com enfoque nos modelos utilizados no trabalho; no capítulo 3, a metodologia utilizada para alcançar cada objetivo específico é descrita em detalhe, seguido pelo capítulo 4, nos quais os

resultados obtidos, juntamente com suas discussões, são apresentados; as conclusões e as principais contribuições desse trabalho são apresentadas de forma resumida no capítulo 5; e por fim sugestões para continuação desta pesquisa como trabalhos futuros são listadas no capítulo 6, seguido pelo capítulo 7 com as referências bibliográficas utilizadas.

2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

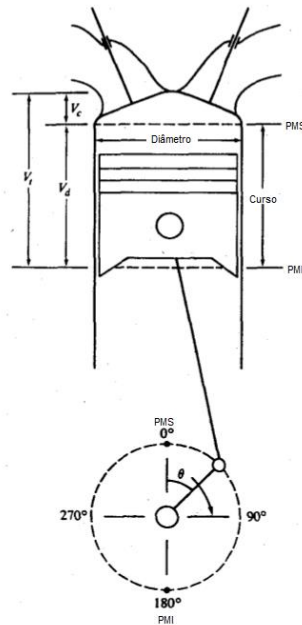
Nesse capítulo é apresentada uma revisão sobre os fundamentos de motores de combustão interna de ignição por centelha com enfoque no diagrama do ciclo indicado teórico e real e na descrição dos tempos do motor; regimes de queima e combustão em motores de ignição por centelha; tipos de combustão: normal e anormal; influência do tipo do combustível na predisposição à detonação. Além disso, algumas tecnologias aplicadas atualmente para redução de consumo de combustível são brevemente apresentadas, dando atenção principal à injeção direta de etanol e à tecnologia *downsizing*. Os modelos matemáticos relevantes para a pesquisa também são descritos nesse capítulo, como por exemplo, as equações de conservação da fase contínua e da fase dispersa e a modelagem da combustão no motor. Por fim, são apresentados alguns trabalhos de simulações 3D de motores de combustão interna utilizando modelos de cinética química.

2.1 – Motores de combustão interna

Os motores de combustão interna podem ser classificados de diversas maneiras. Uma delas é quanto ao sistema de início do processo de combustão, na qual temos os motores de ignição por centelha (muitas vezes denominados motores de ciclo Otto) e os motores de ignição por compressão (muitas vezes denominados motores de ciclo Diesel). Este trabalho é desenvolvido utilizando um motor de ignição por centelha de quatro tempos, portanto, foco será dado nesse tipo de motor e o leitor interessado pode encontrar informações sobre outros tipos em TAYLOR 1988, HEYWOOD, 1988 E BURMAN, 1962.

Os motores alternativos operam com o movimento cíclico de subida e descida do pistão que é convertido em movimento rotativo através de um mecanismo biela-manivela. O pistão possui velocidade nula no ponto morto superior (PMS) e no ponto morto inferior (PMI), quando o volume do cilindro é mínimo e máximo respectivamente. O menor volume do cilindro é chamado de volume da câmara de combustão (V_{cc}). O volume varrido pelo pistão, ou seja, a diferença entre o volume total (V_t) e o volume da câmara de combustão é chamada de volume deslocado (V_d). A razão entre o volume máximo pelo mínimo é chamada de razão volumétrica de compressão (r_c) (HEYWOOD, 1988). A Figura 2.1 é um esquema da uma seção do motor com as distâncias que geram os respectivos volumes.

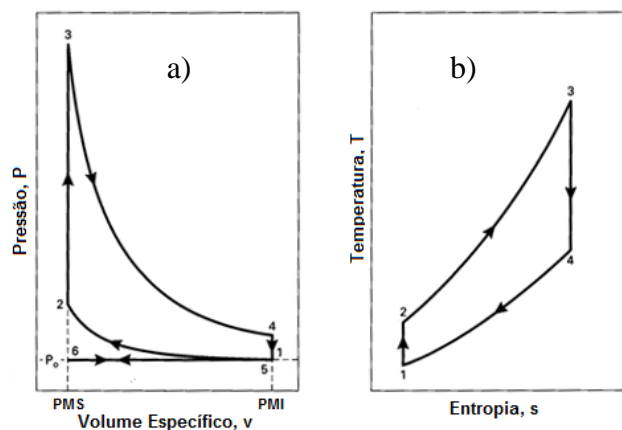
Figura 2.1 - Geometria básica de um motor alternativo com os pontos de referência: ponto morto superior (PMS) e ponto morto inferior (PMI).



Fonte: adaptado de HEYWOOD, 1988

O ciclo termodinâmico de referência dos motores de ignição por centelha é o ciclo Otto, que é um ciclo teórico fechado. Alguns autores utilizam outro ciclo idealizado, que é chamado de ciclo de ar padrão, o qual é derivado do ciclo Otto, porém com entrada e saída de massa e como fluido de trabalho sendo somente ar se comportando como gás ideal. O ciclo de ar padrão é composto por seis etapas (como pode ser visto através do diagrama pressão por volume na Figura 2.2-a ou temperatura por entropia, na Figura 2.2-b).

Figura 2.2 – Ciclo Otto ideal: 6-1: admissão a pressão constante; 1-2: compressão isentrópica; 2-3: Introdução de calor à volume constante; 3-4: expansão isentrópica; 4-5:exaustão a volume constante e 5-6: exaustão à pressão constante.



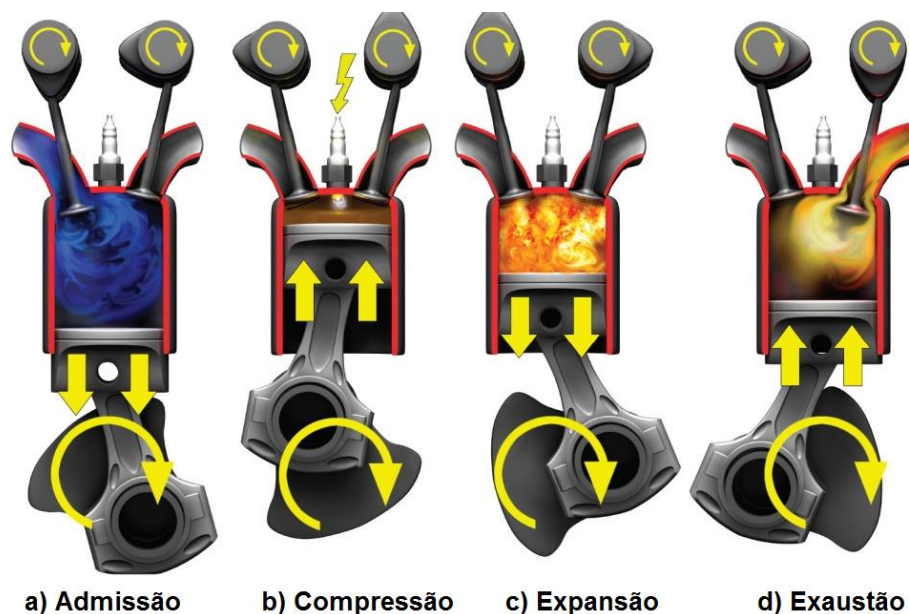
Fonte: adaptado de PULKRABEK, 1997

Os quatro tempos dos motores são admissão, compressão, expansão e exaustão, conforme pode ser visto na Figura 2.3. O tempo de admissão começa com o pistão no PMS, no qual ar é induzido para o cilindro à pressão constante, na medida em que o pistão se desloca em direção ao PMI, (processo 6-1 da Figura 2.2). O tempo de compressão é composto por uma compressão isentrópica do gás com pistão no PMI até o PMS (processo 1-2). No ponto morto superior, calor é adicionado a volume constante (processo 2-3), aumentando a pressão e a temperatura do gás. Os valores elevados de pressão e entalpia no PMS (ponto 3) geram o tempo de expansão, também chamado de tempo de potência, no qual é uma expansão isentrópica do gás desde o ponto morto superior até o ponto morto inferior (processo 3-4). O último tempo do motor é o tempo de exaustão, no qual calor é rejeitado para a fonte fria, composto por duas etapas: a primeira a volume constante (processo 4-5) e a segunda a pressão constante (5-6), com o pistão se deslocando do PMI até o PMS para dar início ao ciclo novamente.

A eficiência térmica do ciclo (razão entre o trabalho realizado pelo calor introduzido) pode ser expressa em função da razão volumétrica de compressão, r_c , e da razão entre os calores específicos a pressão e a volume constante do gás, γ :

$$\eta_{térmica} = 1 - \frac{1}{r_c^{\gamma-1}} \quad (1)$$

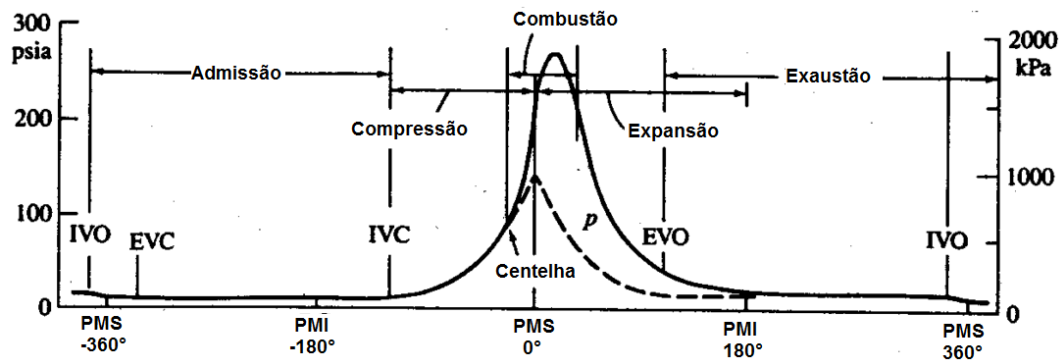
Figura 2.3 – Quatro tempos do ciclo dos motores de combustão interna.



Fonte: DSPORT, 2018

Cada tempo do motor corresponde, em teoria, a um deslocamento angular de 180° do eixo do virabrequim, ou eixo do motor. No ciclo real de um motor, a duração de cada tempo pode não coincidir com o intervalo entre PMS e PMI (180°) em virtude do adiantamento ou atraso de determinados eventos no motor, como é mostrado no gráfico de pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do virabrequim, para um motor real, na Figura 2.4.

Figura 2.4 – Diagrama de pressão em função do ângulo do eixo do motor com a duração real de cada tempo de um típico motor de combustão interna.



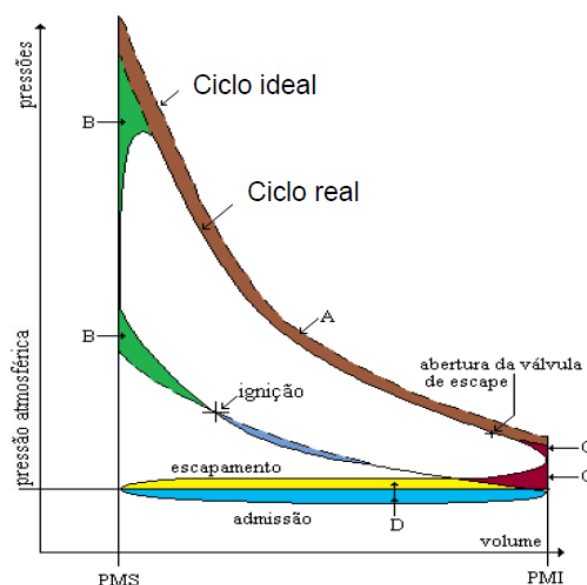
Fonte: adaptado de HEYWOOD, 1988

Para exemplificar essa diferença, a válvula de admissão é usualmente fechada após o ponto morto inferior, com o pistão já em direção ao PMS, para aproveitar a inércia do gás entrando no cilindro e conseguir que maior quantidade de gás fique aprisionada. Também pode ser de interesse que o tempo de compressão tenha uma duração menor que o tempo de expansão, o que é acontece no chamado ciclo Miller, para reduzir o trabalho de compressão ou fazer controle de carga do motor sem precisar fechar demasiadamente a válvula borboleta e reduzir a pressão na admissão (reduzindo o trabalho necessário para fazer com que o gás entre no cilindro - chamado de trabalho de bombeamento). O tempo de compressão de um motor real também não corresponde a 180° de deslocamento do eixo virabrequim, uma vez que a introdução de calor no ciclo é feita através da combustão do ar com um combustível. A combustão não acontece de forma instantânea, e nem a volume constante como no ciclo teórico, mas possui um tempo um tempo finito de duração. Dessa forma, é usual dar início ao processo com o pistão ainda no tempo de compressão, antes de atingir o PMS. A não introdução de calor de forma instantânea no ciclo reduz o trabalho gerado, como pode ser visto na Figura 2.5 com a área indicada com a letra B. Os processos de expulsão dos gases queimados para fora do cilindro, assim como o de indução de mistura fresca para dentro, não ocorrem à pressão constante como indicado no ciclo teórico, mas sim existe um trabalho gasto

nesse processo, indicado como as áreas azul e amarela da Figura 2.5. A válvula de exaustão é aberta antes que o pistão atinja o PMI para aproveitar a maior diferença de pressão dentro e fora do cilindro e expulsar grande parte dos gases gerados na combustão (evento chamado de *blowdown*). O tempo ótimo da abertura da válvula de exaustão está relacionado com um balanço entre aproveitamento de trabalho de expansão e redução de trabalho de bombeamento. O evento do *blowdown*, assim como o da combustão, também demanda um tempo para ocorrer, o que acarreta nas perdas mostradas na área demarcada com a letra C na Figura 2.5. Em algumas condições do motor a válvula de admissão pode ter sua abertura antecipada (ao invés de ocorrer no PMS), seja para reter gás queimado no cilindro ou para aproveitar a inércia dos gases de exaustão e aumentar a quantidade de mistura fresca aprisionada no cilindro.

Outros efeitos físicos fazem com que o ciclo real seja diferente do ciclo teórico. O fluido de trabalho, por exemplo, é composto de uma mistura de ar e combustível que tem suas propriedades termodinâmicas alteradas em função da variação da temperatura e devido às reações químicas que ocorrem durante a combustão (se transformando, sobretudo, em CO_2 , H_2O e N_2). Essas diferenças podem ser vistas como a área denominada A, na Figura 2.5 (PULKRABEK, 1997, GIACOSA, 1988).

Figura 2.5 – Comparação do diagrama indicado (pressão x volume) entre o ciclo Otto ideal e real, com as respectivas perdas de trabalho.



Fonte: adaptado de GIACOSA, 1988 (apud. TEIXEIRA, 2015)

2.2 – Processos de combustão em motores

Nos motores Diesel, as chamas são chamadas de difusão: o combustível e o oxidante são injetados em correntes separadas e sua mistura ocorre por difusão turbulenta. Nesse tipo de chama, a região em que as reações ocorrem – chamada de frente de chama – é da ordem de milímetros. Em contrapartida, nos motores de ignição por centelha, em geral, as chamas são do tipo chamadas de pré-mistura. Nesse caso, o combustível e o oxidante são misturados previamente e introduzidos na chama em uma corrente única, o fenômeno dominante é o tempo das reações químicas e a frente de chama é uma região muito fina com espessura da ordem de 0,1 mm, podendo ser laminar ou turbulenta (GLASSMAN, 2008). A injeção de combustível na maioria dos motores de ignição por centelha convencionais é feita por eletroinjetores posicionados no duto de admissão, próximos às válvulas de admissão de cada cilindro, esse tipo de injeção é comumente chamada de injeção PFI, da sigla em inglês *port fuel injection*. Nesse tipo de injeção, existe tempo suficiente para formação de uma mistura pré-misturada. Outro tipo de injeção de combustível utilizada é a injeção direta, na qual o combustível é injetado diretamente na câmara de combustão do motor. Quando a injeção é feita durante a fase de admissão do motor, a mistura é dita pré-misturada. Quando a injeção é feita na fase de compressão, pode não haver tempo hábil para uma mistura completa do combustível com ar, e, dessa forma, pode ocorrer, em conjunto com a chama de pré-mistura, a chama de difusão.

Em condições normais de operação, a combustão é iniciada, próximo ao fim da compressão, por uma centelha elétrica da vela de ignição. Seguida da inflamação, uma chama turbulenta se desenvolve e propaga pelos gases pré-misturados de combustível, ar e gases queimados até atingir as paredes da câmara de combustão onde se extingue (FERGUSON, 2001). As fases da combustão nos motores de ignição por centelha podem ser divididas em quatro: centelha, início do desenvolvimento da chama, propagação da chama e extinção da chama.

Segundo HEYWOOD (1988), as fases da centelha podem ser divididas em três etapas:

- *Breakdown*: O potencial elétrico entre os eletrodos da vela de ignição aumenta até que ocorre o rompimento da rigidez dielétrica do gás, formando um estreito canal de gás ionizado. Dura cerca de 10 ns e a temperatura e a pressão no canal são da ordem de 60.000 K e algumas centenas de atmosferas. Uma onda de choque se propaga

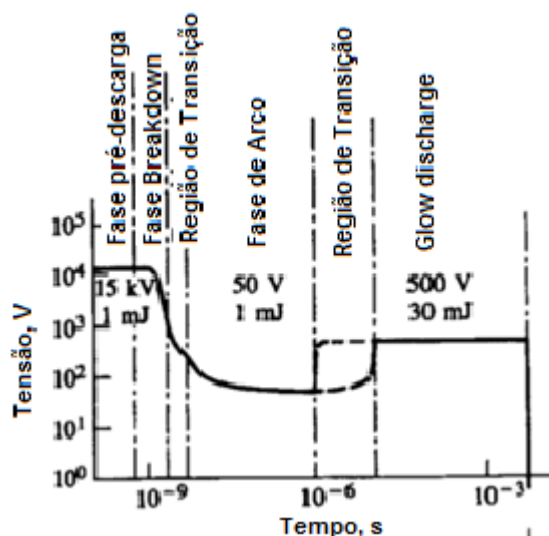
expandindo o canal e reduzindo pressão e temperatura, transferindo grande parte de sua energia para o gás em uma pequena esfera de aproximadamente 2 mm de diâmetro.

- *Arc*: o plasma cilíndrico se expande amplamente devido à condução e difusão de calor e, com uma mistura inflamável, as reações exotérmicas levam a um desenvolvimento da chama. O arco aumenta em tamanho principalmente devido à condução de calor e a difusão de massa. Em razão a essa transferência de energia, a temperatura do gás no arco é limitada a 6.000 K e a temperatura e o grau de dissociação diminuem rapidamente com o aumento da distância no eixo do arco.
- *Glow discharge*: dependendo dos detalhes do sistema de ignição, o dispositivo de armazenamento de energia irá amortecer sua energia no circuito de descarga. As perdas de energia são maiores do que na fase de arco e a temperatura de pico de equilíbrio de gás são na ordem de 3.000 K.

Sistemas convencionais de ignição fornecem de 30 a 50 mJ de energia elétrica para a centelha. A fase de *breakdown* atinge o maior nível de potência (~ MW), mas a energia fornecida é pequena (0,3 a 1 mJ). A fase de *glow discharge* tem o menor nível de potência (~10 W), mas tem a maior energia (30 a 100 mJ) devido à sua maior duração. A fase de arco fica entre elas. As etapas da centelha elétrica com os respectivos valores de tensão estão ilustradas na

Figura 2.6 (HEYWOOD, 1988).

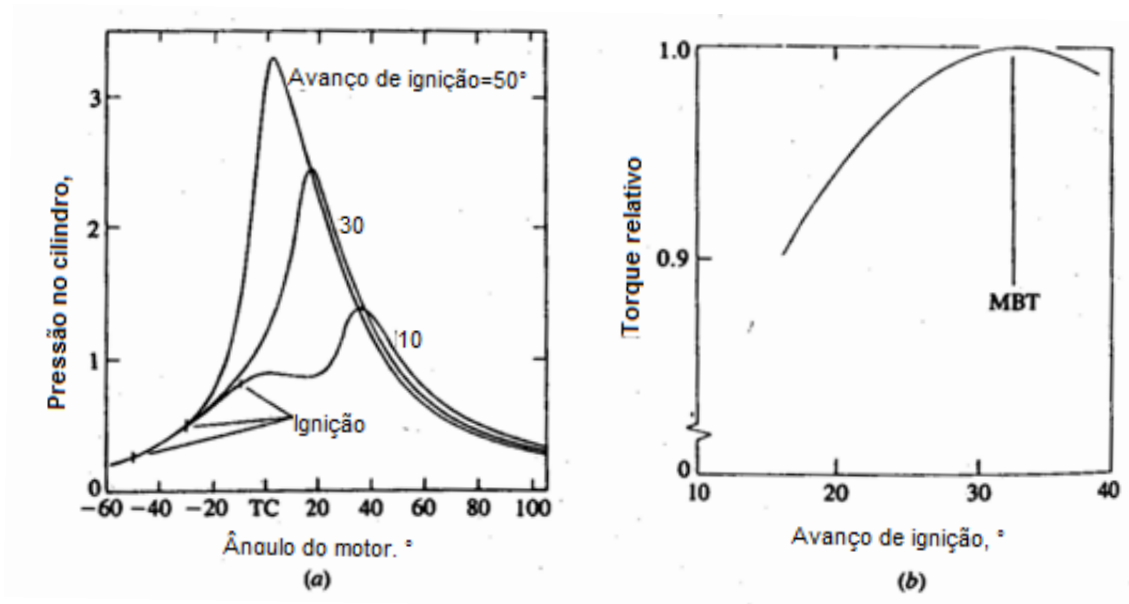
Figura 2.6 – Fases da centelha elétrica com a respectiva tensão elétrica e quantidade de energia.



Fonte: adaptado de HEYWOOD, 1988

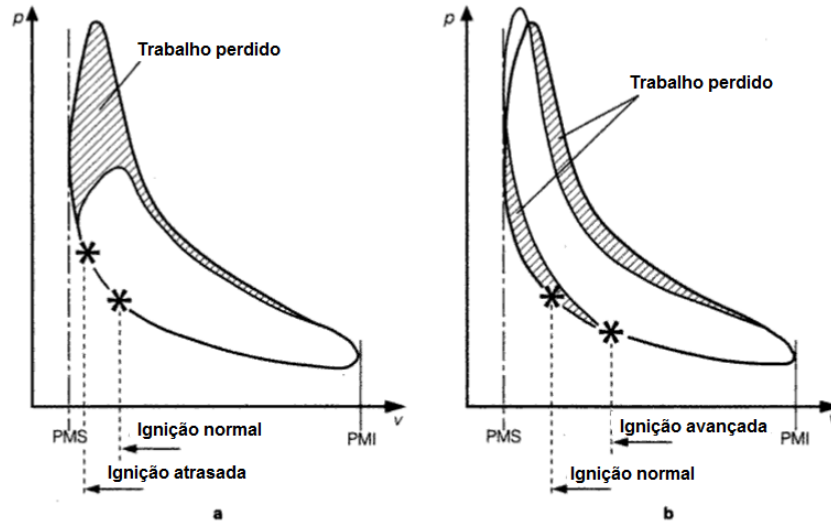
A duração típica de uma combustão normal está entre 30 e 90 graus do eixo do motor, dessa forma o início da combustão deve estar devidamente localizado no ciclo do motor. Na medida em que o início da combustão é progressivamente adiantado em relação ao ponto morto superior (chamado de avanço de ignição – normalmente dado em graus do eixo do virabrequim antes do ponto morto superior), a pressão dentro do cilindro tende a aumentar seu valor e o instante de pressão máxima ocorre mais adiantado no ciclo, como pode ser visto na Figura 2.7-a. Dessa forma, o trabalho de compressão, que é do pistão sobre o gás no cilindro, aumenta e o trabalho útil do ciclo diminui, como é mostrado na Figura 2.8-a. Se o início da combustão for atrasado, o pico de pressão ocorre mais tarde no tempo de expansão e sua magnitude é reduzida. Isso faz com que o trabalho transferido do gás para o pistão seja reduzido (Figura 2.8-b). Existe um avanço de ignição ótimo, que representa o melhor compromisso entre as duas reduções de trabalho citadas, na qual o torque será máximo – chamado de avanço de ignição para MBT, do inglês *maximum brake torque*, como pode ser visto na Figura 2.7-b.

Figura 2.7 – a) Pressão no cilindro em função do ângulo do motor para diferentes avanços de ignição; b) Torque relativo de eixo em função do avanço de ignição.



Fonte: adaptado de HEYWOOD, 1988

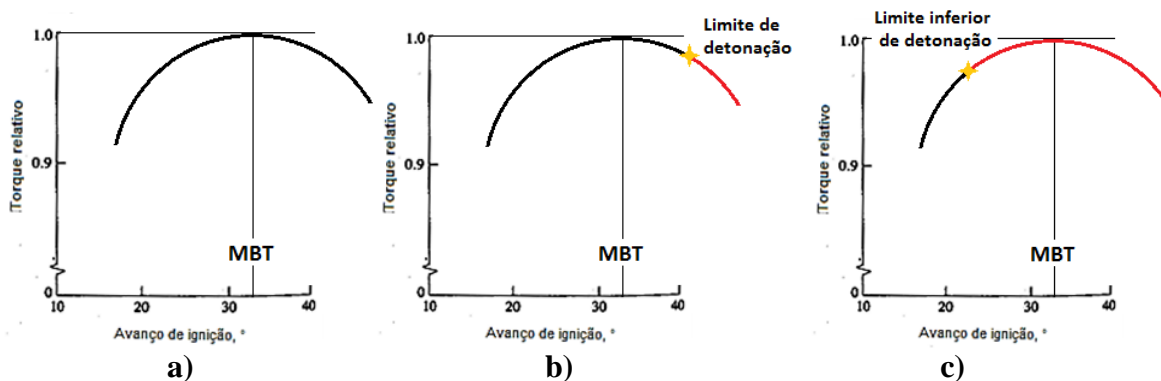
Figura 2.8 – Diagrama indicado comparando a perda de trabalho por avanço de ignição atrasado e adiantando em relação ao avanço normal.



Fonte: adaptado de GIACOSA, 1988

Conforme observado na Figura 2.7-a), na medida em que se adianta o instante de ignição, os gases na câmara de combustão são submetidos a maiores pressões e conseqüentemente a maiores temperaturas. Isso aumenta a propensão da mistura ar-combustível à frente da frente de chama, que ainda não foi queimada, de sofrer um processo de autoignição, que, dependendo de determinadas condições da mistura e do instante que ela ocorrer, pode promover um fenômeno chamado de detonação, que é prejudicial ao motor. Quando esse fenômeno ocorre devido ao aumento do avanço de ignição é chamado limite de detonação. A Figura 2.9 a) mostra uma condição de um motor que apresenta o ponto de máximo torque de eixo (MBT) sem apresentar detonação. A Figura 2.9 b) mostra uma condição que apresenta o ponto de MBT e, quando o avanço de ignição é aumentado, atinge-se o limite de detonação (LD). Evidentemente não existe finalidade prática de se continuar aumentando o avanço de ignição após atingir o ponto MBT, deteriorando assim o torque do motor e atingindo uma condição de detonação. Porém, pode acontecer do limite de detonação ocorrer muito próximo do ponto de MBT (separados por apenas 1 ou 2 graus do ângulo do eixo do motor), o que faz com que o motor seja calibrado com um intervalo de segurança maior, não atingindo o ponto de máximo torque. Pode acontecer também do limite de detonação ocorrer antes do ponto de MBT, como é mostrado na Figura 2.9 c), chamado de limite inferior de detonação (LID).

Figura 2.9 – a) Condição em que um motor apresentou ponto de máximo torque de eixo sem limitações por detonação, b) condição com MBT e limite de detonação para avanços de ignição superiores ao de MBT e c), condição de MBT limitada pela presença da detonação.



Fonte: Adaptado de HEYWOOD, 1988

Existem várias formas de se modelar o processo de combustão de carga homogênea de ignição por centelha. Os modelos variam de modelos simples de duas zonas (gases não queimados e gases queimados separados pela frente de chama turbulenta) até modelos de equações diferenciais resolvidos numericamente. Alguns parâmetros de combustão utilizados pelos modelos incluem a velocidade de chama laminar, espessura da chama, velocidade de chama turbulenta e a intensidade de turbulência. A velocidade de chama laminar ' sl ' é uma característica bem definida de uma mistura de combustível e ar. Ela representa a velocidade na qual uma chama unidimensional se propaga em um gás não queimado sob condições adiabáticas. A velocidade laminar de chama depende da pressão, temperatura e composição do gás não queimado, possui um valor máximo para misturas ligeiramente ricas e é fortemente influenciada pela temperatura dos gases não queimados (devido à relação exponencial das reações cinéticas com a temperatura) e levemente pela pressão (FERGUSON, 2001).

Existem três regimes de chama turbulenta: chama laminar enrugada, vórtices de flâmulas e reações distribuídas. Os motores de combustão interna de ignição por centelha operam no regime de chama laminar enrugada e vórtices de flâmulas, dependendo da velocidade do motor. No regime de chama laminar enrugada, a espessura da chama é mais fina que a espessura do menor vórtice de turbulência e a intensidade turbulenta é da mesma ordem de grandeza da velocidade de chama laminar. O efeito da turbulência no cilindro, portanto, é de enrugar e distorcer a frente de chama. No campo de escoamento, os vórtices turbulentos espalham campos de ignição por meio de vórtices de bordas irregulares que emergem da vela

de ignição. Para condições de escoamento turbulento, a escala de enrugamento é da ordem de 1 mm e a da chama é menor do que 0,01 mm de espessura. A velocidade da chama turbulenta pode ser de 3 a 30 vezes maior que a velocidade da chama laminar, dependendo da intensidade de turbulência. Uma vez que a intensidade de turbulência depende da velocidade de rotação do motor, em maiores velocidades a região de chama turbulenta pode transitar de folha enrugada para flâmulas no regime de vórtices. No regime de flâmulas em vórtices, a espessura da chama é maior que a menor escala de vórtice de turbulência, mas menor que a escala integral, e a intensidade de turbulência é bem maior do que na velocidade de chama laminar. O aumento no enrugamento pode resultar em bolsões de gases não queimados. Nesse regime, a taxa de queima é controlada pela taxa de mistura turbulenta, isto é, pelo comprimento da escala integral e não pela taxa de reação química (FERGUSON, 2001).

2.3 – Variáveis de desempenho e controle de um motor

Segundo Heywood (HEYWOOD, 1988), o torque de um motor é a medida da habilidade do mesmo em realizar trabalho, enquanto a potência é a taxa na qual o trabalho é realizado. O torque por sua vez depende do tamanho do motor, sendo que motores maiores tendem a ter maiores torques. Dessa forma, um parâmetro que melhor avalia desempenho de um motor, por ser independente do tamanho, é a pressão média efetiva PME (ou do inglês MEP). Ela é obtida ao se dividir o trabalho gerado no ciclo pelo volume deslocado e representa uma pressão média constante que, se aplicada no volume deslocado do motor, terá o mesmo trabalho do ciclo real. O equacionamento é mostrado na Equação (2):

$$PME = \frac{W}{V_d} = \frac{P \times nr}{V_d \times N} \quad (2)$$

no qual, P é a potência, nr é número de revoluções por ciclo, V_d é volume deslocado pelo pistão e N é a rotação do eixo do motor. Uma vez que a energia e o trabalho produzido por ciclo é proporcional à massa de combustível queimada e essa por sua vez é limitada pela quantidade de ar aprisionada dentro do cilindro, muitas vezes a carga do motor pode ser relacionada com a pressão média efetiva, como será utilizado nesse trabalho. A nomenclatura “T”, por exemplo, em IMEP (do inglês *indicated mean effective pressure*), representa grandezas indicadas, ou seja, referentes aos valores medidos dentro do cilindro. Se a

nomenclatura for acompanhada de “B”, como em BMEP (*brake mean effective pressure*), os dados são referentes a valores medidos pelo dinamômetro acoplado ao eixo do virabrequim.

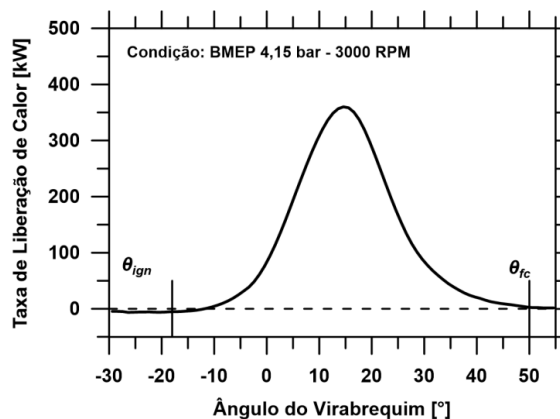
A razão entre a massa de ar pela massa de combustível em que o motor está operando define a razão ar/combustível. Se ela for dividida pela relação ar/combustível que forneça uma reação de combustão estequiométrica, o fator lambda é definido, como é mostrado pela Equação (3):

$$\lambda = \frac{\left(\frac{Ar}{Comb.}\right)_{real}}{\left(\frac{Ar}{Comb.}\right)_{esteq.}} \quad (3)$$

Se o fator lambda é igual a 1 quer dizer que o motor está operando na razão ar/combustível estequiométrica. Se ele for maior que 1, existe uma escassez de combustível em relação ao ar e a mistura é dita como pobre. Se for menor que um, existe um excesso de combustível em relação ao ar, e a mistura é dita como rica.

Como critérios de avaliação de desempenho da combustão, pode-se citar a curva de taxa de liberação de calor por ângulo de virabrequim. Experimentalmente, ela pode ser determinada com posse da curva de pressão no cilindro medida, de informações sobre a mistura, dados geométricos do motor e da equação de estado. O equacionamento para o cálculo da taxa de liberação de calor aparente do motor pode ser encontrada no Anexo A deste documento. Um exemplo deste tipo de curva pode ser visto na Figura 2.10.

Figura 2.10 – Curva da taxa de liberação de calor em função do ângulo do motor obtida com base na curva de pressão medida e o princípio de conservação de energia em um modelo quase-dimensional.



Fonte: CTM-UFMG

2.4 – Combustão anormal

Existem alguns fatores que fazem que a combustão não ocorra de forma “normal” como descrito anteriormente. Um exemplo de combustão anormal é o chamado *misfire* parcial ou *misfire* total. Na medida em que a relação ar-combustível da mistura no cilindro é empobrecida (seja por excesso de ar ou de fração de gás residual) as velocidades de queima diminuem. Pode chegar a um limite em que a operação do motor se torna muito instável e a chama pode começar, mas não haver tempo suficiente para terminar até a abertura da válvula de exaustão, ou até mesmo se apagar até lá – evento chamado de *misfire* parcial. Quando a combustão nem chega a se iniciar na mistura, é chamado de *misfire* total (HEYWOOD, 1988). Com isso, todo combustível não queimado ou queimado parcialmente será expulso pela exaustão, aumentando a quantidade de hidrocarbonetos não queimados e monóxido de carbono emitido (com uma razão de *misfire* de 2% há um aumento de 100 a 200% acima dos níveis aceitáveis de emissões (PULKRABEK, 1997)). Um bom indicador da estabilidade da combustão é a covariância da pressão média efetiva indicada.

Outro modo de combustão anormal de fundamental importância no estudo de motores de combustão interna e tema principal deste trabalho é o fenômeno denominado detonação. Segundo Taylor (TAYLOR, 1988), entende-se por detonação o fenômeno reconhecido por “batida de pino”. Esse termo é decorrente do som audível característico que os motores emitem quando sujeitos a esse fenômeno. É causado pela autoignição da mistura não queimada ou do gás à frente da frente de chama que não foi queimado ainda, gerando ondas de pressão que viajam pelos gases de combustão (FERGUSON, 2001). O termo “detonação”, na teoria de motores, não é o mesmo definido na teoria da combustão. Uma onda de combustão que se desloca com velocidades subsônicas é denominada deflagração. Uma onda de combustão que se desloca com velocidades supersônicas é chamada de detonação na teoria de combustão (TURNS, 2013). O termo “detonação” para representar o fenômeno de batida de pino, vem da tradução do termo em inglês *knock* e não representa necessariamente uma onda de combustão com velocidades supersônicas, como é na definição no estudo de combustão. O termo “detonação” em motores é utilizado para se referir à interação de duas ou mais ondas de deflagração (causada por uma ignição espontânea da mistura), que acarreta em velocidades elevadas de chama, podendo eventualmente atingir velocidades supersônicas (MACHADO, 2012). Conforme Sharma (SHARMA, 1984), o som de batida causada pela autoignição possui um tom mais baixo do que o proveniente da onda de detonação. A reação

na onda de detonação requer de 25 a 50 milissegundos e a onda viaja na velocidade entre 1000 a 2000 m/s. A autoignição da mistura no cilindro acontece entre 400 a 2000 m/s (SHARMA, 1984 e WANG *et al.*, 2017). Segundo WANG *et al.* (2017) o regime de combustão de detonação é pouco provável de ocorrer em motores de combustão interna naturalmente aspirados de ignição por centelha, devido à baixa taxa de liberação de calor, às pequenas distâncias entre as paredes da câmara e à temperatura das paredes relativamente baixas. Apesar do termo detonação, quando utilizado para se referir de uma autoignição em motores de combustão, não necessariamente representar uma detonação no sentido de onda de choque, esse termo será utilizado neste trabalho devido à sua extensa aceitação no meio científico.

A detonação é extremamente prejudicial ao motor quando ocorre de forma intensa e contínua e, quando não severas, são fontes de ruído e vibração e redução de eficiência. Segundo WANG *et al.* (2012), foi visto que cerca de 40% da energia total do combustível era perdida por transferência de calor com as paredes em condições de detonação severas (reduzindo a eficiência térmica). Segundo Ferguson (FERGUSON, 2001), as rápidas flutuações de pressão que ocorrem em conjunto podem romper a camada térmica do cilindro, causando temperaturas elevadas na superfície do pistão, resultando em erosão superficial e falha, como pode ser visto na Figura 2.11.

Figura 2.11 – Efeitos da operação contínua em regime de detonação em motores de combustão interna.



Fonte: a) adaptado de WANG *et al.*, 2017

Quando essa combustão anormal ocorre, existe uma liberação extremamente rápida de maior parte da energia química da mistura, o que causa pressões locais muito elevadas e a propagação de ondas de pressão de amplitude considerável através das paredes da câmara de combustão (HEYWOOD, 1988). Heywood distingue esse tipo de combustão anormal em dois grupos principais: a superfície de ignição e o *knock*:

- Superfície de ignição: é a ignição da mistura ar-combustível ocasionada pela presença de um ponto quente nas paredes da câmara de combustão, como por exemplo, superaquecimento das válvulas, da vela de ignição ou de depósitos de carvão na câmara. Pode ocorrer antes da centelha (pré-ignição) ou depois (pós-ignição). Acompanhando a superfície de ignição, uma chama turbulenta se desenvolve em cada superfície de ignição e começa a se propagar pela câmara de maneira análoga ao que ocorre na combustão de centelha convencional.
- *Knock*: ocorre geralmente em condições de plena carga e dessa forma é uma restrição direta da eficiência do motor, uma vez que limita a temperatura e o gás do final da compressão, limitando também a razão volumétrica de compressão do motor. A sua ocorrência e severidade dependem da resistência à detonação do combustível e das características antidetonantes do motor. A habilidade do combustível de resistir à detonação é medida pelo número de octanos: maiores números de octanos indicam maiores resistências à autoignição. O número de octanos da gasolina pode ser aumentado através do processo de refinamento, como por exemplo, o craqueamento catalítico, o qual converte hidrocarbonetos de baixa octanagem em hidrocarbonetos de alta octanagem. Além disso, aditivos antidetonantes como álcoois podem ser utilizados. O requisito de octanagem de um motor depende do projeto e das condições de operação que afetam a temperatura e pressão do gás a frente da chama e do tempo necessário para a queima da mistura.

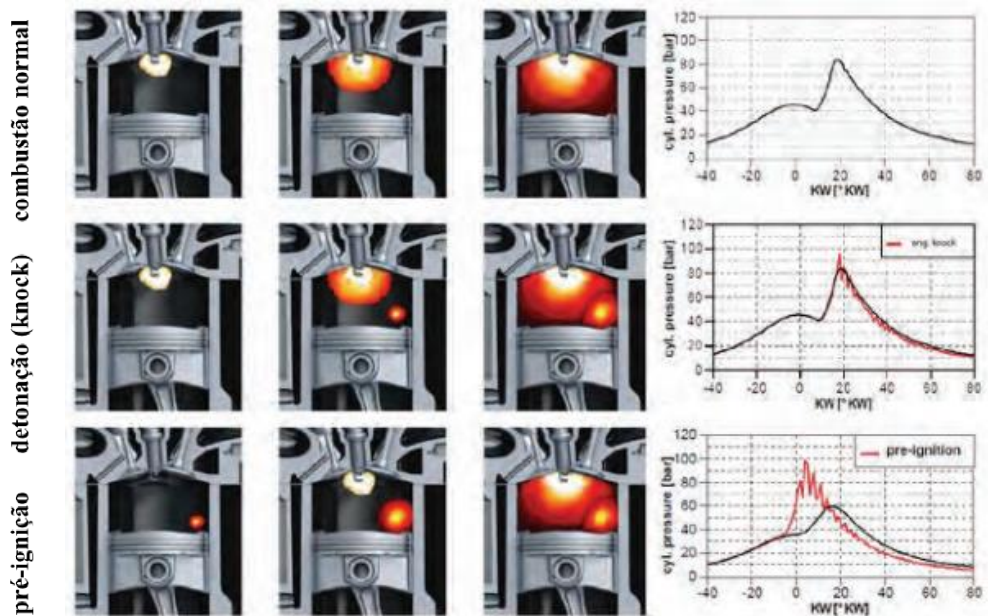
A Figura 2.12 mostra três processos de combustão com os respectivos traços de pressão no cilindro. O processo na parte superior dessa figura é de uma combustão dita normal. O processo mostrado na região central da figura é de uma autoignição da mistura causada após a centelha. A interação da frente de chama proveniente da centelha com a frente de chama proveniente da autoignição causa a detonação (*knock*), que pode ser visto também por meio das oscilações na curva de pressão no cilindro (gráfico do lado direito da Figura 2.12). O

processo ilustrado na parte inferior da Figura 2.12 é de uma autoignição da mistura antes da centelha elétrica – pré-ignição.

Além do processo de detonação convencional, atualmente tem se investigado um novo tipo de detonação em motores sobrealimentados com elevadas densidade de potência chamado de super-detonação (ou também de *mega knock*, *low-speed pre-ignition*, *stochastic pre-ignition* e etc.). A maior diferença entre a detonação convencional e a super-detonação é a amplitude do aumento de pressão no início da detonação, que no caso da super-detonação é uma ordem de grandeza maior que da detonação convencional. Na Figura 2.13 são mostradas as curvas de pressão do gás no cilindro e da taxa de liberação de calor de um processo de combustão, normal, de uma detonação convencional e de uma super-detonação.

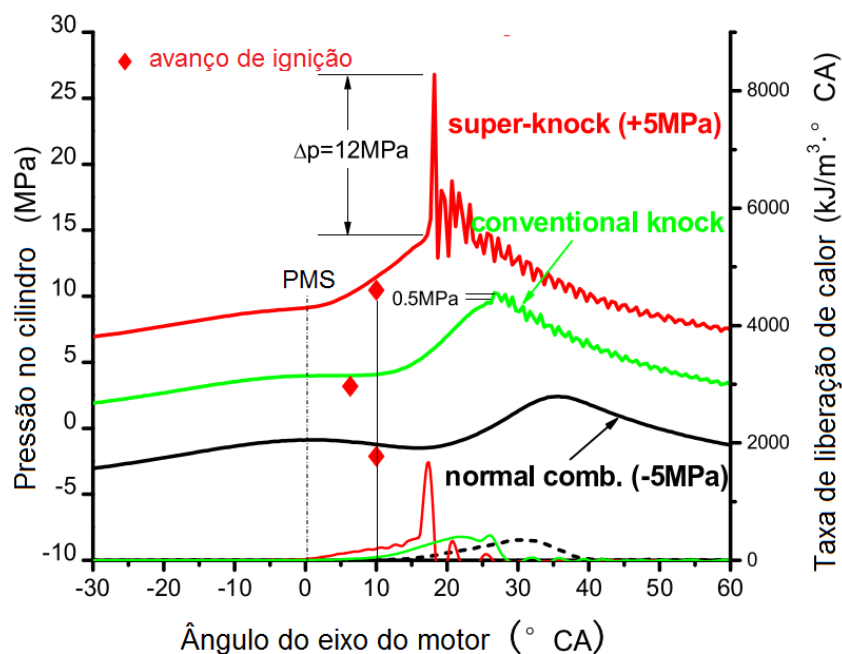
Para o leitor interessado nos trabalhos atuais e no que já foi feito sobre detonação em motores de combustão interna, recomenda-se a leitura de WANG *et al.*, 2017, que realiza um estudo de revisão literária bem completo sobre o assunto.

Figura 2.12 – Três processos de combustão: normal (parte superior), detonação pós-ignição (meio), detonação com pré-ignição (baixo) com os respectivos traços de pressão no cilindro em função do ângulo do motor para cada processo.



Fonte: adaptado de GÜNTHER *et al.*, 2017

Figura 2.13 – Comparação da curve de pressão do gás no cilindro e da taxa de liberação de calor de uma combustão normal, detonação convencional (*conventional knock*) e uma super-detonação (*super-knock*).

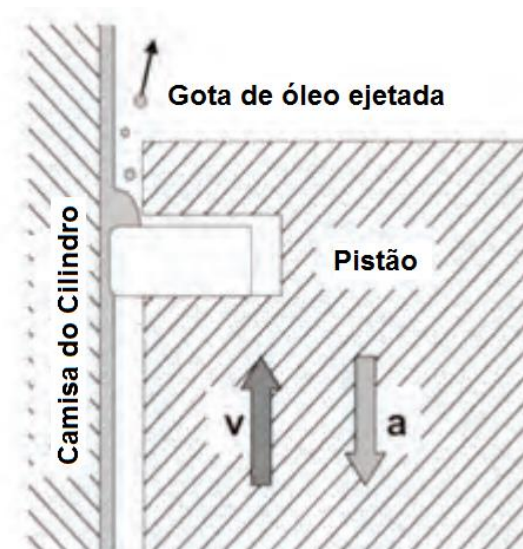


Fonte: adaptado de WANG et. al., 2015

Geralmente, a pré-ignição da mistura tende a ser mais crítica para o motor, uma vez que toda a mistura no cilindro ainda não foi queimada e a quantidade de energia que poderá ser liberada de forma rápida é maior. Além disso, diferentemente da autoignição após a centelha, alterar o instante da centelha não surtirá efeito sobre a pré-ignição. O que deve ser feito é a completa desativação do fornecimento de combustível ao motor, o que muitas vezes resulta em uma pior dirigibilidade do veículo e pode ser um problema de segurança durante retomadas de aceleração (ROTTENGRUBER E TODSEN, 2013).

O princípio da pré-ignição pode ser evitado com um correto arrefecimento das paredes do motor e uma correta escolha do tipo e do posicionamento da vela de ignição. Outro causador de pré-ignição é a contaminação do combustível por óleo lubrificante, como por exemplo, ocorre nos motores com injeção direta na câmara de combustão. Quando o combustível molha as paredes do cilindro, óleo lubrificante é diluído, o que aumenta a propensão de ejeção das gotas de óleo/combustível da região da folga entre o anel do pistão e a camisa do cilindro (DÖHLER E PRITZE, 2013), como é mostrado na Figura 2.14.

Figura 2.14 – Desenho esquemático do processo de ejeção de gota de óleo para a câmara de combustão no tempo que o pistão está com velocidade em direção ao ponto morto superior, porém desacelerado.



Fonte: adaptado de DÖHLER E PRITZE, 2013

2.5 – Fundamentos da autoignição

A seguinte seção foi retirada de HEYWOOD, 1988 com o intuito de fornecer ao leitor uma base para entender as análises feitas nas discussões dos resultados deste trabalho a cerca da propensão à detonação de cada mecanismo analisado com base na sua estrutura.

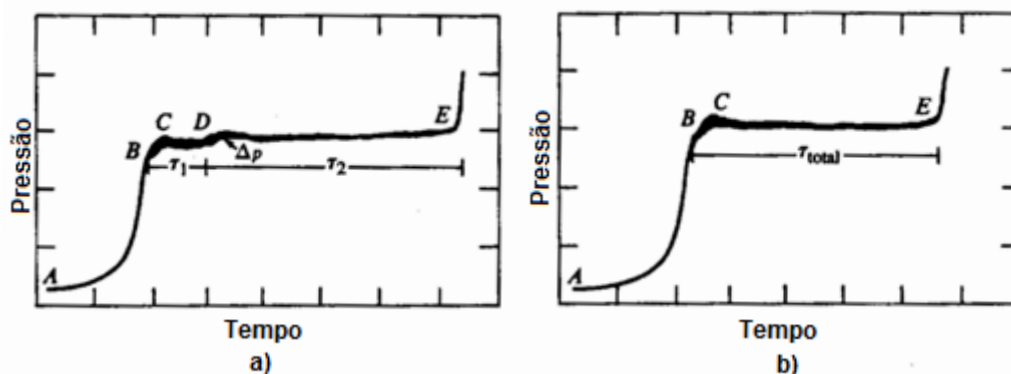
O processo no qual um hidrocarboneto é oxidado pode exibir quatro tipos de comportamentos diferentes, ou uma combinação sequencial deles, dependendo da pressão e temperatura da mistura:

1. Reações lentas: são fenômenos de baixa pressão e temperatura ($<200^{\circ}\text{C}$), que normalmente não ocorre em motores.
2. Única ou múltiplas chamas frias (reações ligeiramente exotérmicas): de 300 a 400°C uma ou mais ondas de combustão geralmente surgem, acompanhadas da emissão de uma luz azul fraca. Entretanto a chama se apaga quando apenas uma pequena fração de reagentes reage e o aumento de temperatura é de apenas algumas dezenas de graus.
3. Ignição de dois estágios (chama fria seguida de chama quente): dependendo das condições e do combustível, uma chama fria pode ser acompanhada de uma chama quente ou de explosão a elevadas temperaturas, na qual a reação se acelera rapidamente após a ignição.

4. Ignição de único estágio (chama quente): na medida em que a temperatura da mistura aumenta, uma transição da ignição de dois estágios para um estágio ocorre. Enquanto todos os hidrocarbonetos exibem intervalos de indução que são acompanhados de uma rápida taxa de reação, alguns compostos de hidrocarbonetos não exibem a chama fria ou ignição de dois estágios.

O fenômeno da chama fria varia com a estrutura do hidrocarboneto. Parafinas comuns geram chamas frias intensas, parafinas com cadeias ramificadas são mais resistentes. Olefinas geram chamas frias com ainda menores luminosidades e com maiores períodos de indução. O metano mostra ignição apenas na região de temperaturas elevadas. Benzeno também não exibe o fenômeno da chama fria e outros aromáticos produzem luminosidades de difícil detecção. É sabido que alguns compostos detonam em baixas temperaturas pelo mecanismo de ignição de dois estágios, outros, via mecanismo de estágio único em altas temperaturas e, para outros combustíveis, ambos os mecanismos ocorrem. A Figura 2.15 mostra o traço de pressão de dois experimentos, em condições diferentes, de uma mistura homogênea de isooctano e ar em uma máquina de compressão rápida. Na Figura 2.15, a curva de pressão A – B – C é causada pela compressão do pistão. A Figura 2.15 a) mostra uma chama fria bem definida D, que precede uma chama quente no ponto E. A Figura 2.15 b) mostra uma ignição de estágio único em temperaturas elevadas.

Figura 2.15 – Traço de pressão de uma autoignição de isooctano e ar em uma máquina de compressão rápida. A Figura a) mostra um processo de ignição de dois estágios (primeira estágio no ponto D e segundo estágio no ponto E); a Figura b) mostra um processo de ignição de único estágio no ponto E.

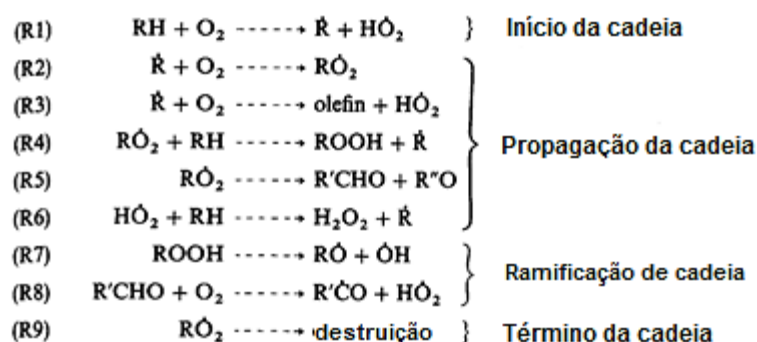


Fonte: adaptado de HEYWOOD, 1988

As explicações dos longos períodos de indução são baseadas na formação de compostos intermediários instáveis, porém com longa vida. Esses compostos intermediários podem tanto reagir para formar moléculas estáveis ou formar radicais ativos, a dominância e taxa de cada caminho depende da temperatura. Esse processo é chamado de mecanismo de degeneração de ramificações. Hidroperóxidos são compostos metaestáveis intermediários, produzidos no processo de propagação de cadeia em ignições de temperatura baixa. Eles têm a forma de ROOH, na qual R é um radical orgânico (formado pela falta de um átomo de hidrogênio na molécula de combustível). Entretanto, em temperaturas elevadas, ROOH não é mais o produto principal do processo de propagação de cadeia: ao invés disso, é o peróxido de hidrogênio, H₂O₂. Enquanto o H₂O₂ é relativamente estável em baixas temperaturas, acima de 500° C, ele se decompõe em dois radicais de OH.

Um esboço do processo básico de oxidação de hidrocarbonetos (RH), segundo Semenov (1958) (apud. HEYWOOD, 1988) é mostrado na Figura 2.16.

Figura 2.16 – Processo básico de oxidação de hidrocarbonetos por Semenov



Fonte: adaptado de HEYWOOD, 1988

Na Figura 2.16, o índice ponto (·) denota radical ativo e cada linha (˘) denota o número de ligações livres no radical orgânico R. A reação R1 é lenta e explica o período de indução na combustão de hidrocarbonetos. A reação R2 é rápida e possui energia de ativação próxima de zero. A reação R3 gera olefinas conhecidas no processo de oxidação de hidrocarbonetos saturados. As reações R4 e R5 resultam nos principais intermediários. A degeneração das ramificações é proveniente do atraso na decomposição das espécies reativas em R7 e R8. Como um radical é utilizado para formar os reagentes em R7 e R8, os múltiplos radicais não aparecem até que esses reagentes se decompõem.

A seguinte evidência indica a relevância do mecanismo na detonação em motores. Estudos feitos em amostras do gás do final da combustão identificaram produtos de reações de combustão lenta do isooctano; principalmente olefinas, éteres cíclicos e aldeídos ($R'CHO$) e cetonas ($R''CO$). Tais estudos mostram um aumento na concentração de peróxidos (predominantemente H_2O_2 e traços de peróxidos orgânicos) com combustíveis isoparafínicos, os quais mostram comportamento de ignição de dois estágios. Ignições de único estágio em altas temperaturas nos combustíveis como benzeno e tolueno, por exemplo, não apresentam peróxido perceptível. Aldeídos e cetonas foram medidos em concentrações crescentes e significativas em motores tracionados nos quais o pico de temperatura do ciclo foi aumentado gradualmente. Em motores em modo *motoring* (tracionados por um dinamômetro ativo), foi demonstrada a ocorrência de chamas frias, a natureza de dois estágios da autoignição em temperaturas de compressão intermediárias e a transição para processo de ignição por um estágio em relações de compressão muito elevadas (com picos de temperatura muito maiores do que os vistos em combustão em condições de centelha).

Dois tipos de modelos desse processo de autoignição foram desenvolvidos e utilizados: correlações empíricas de indução no tempo; mecanismos químicos que incorporam muitos dos mecanismos de oxidação “completa” de hidrocarbonetos. Segundo Heywood (HEYWOOD, 1988), a habilidade das correlações empíricas de indução no tempo em fornecer predições com precisão aceitável não é clara.

2.6 – Medidas para controlar o aparecimento da autoignição

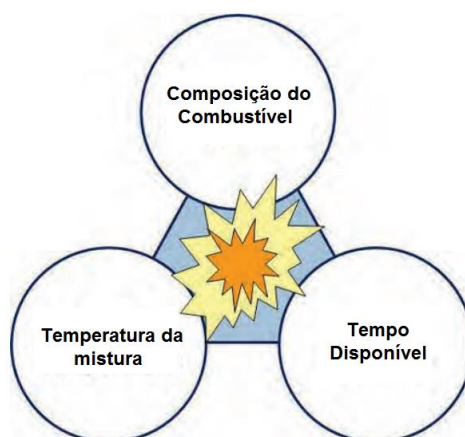
As medidas para mitigar o aparecimento da autoignição estão relacionadas com os três fatores mostrados no desenho esquemático da Figura 2.17.

2.6.1 – Temperatura da carga

As taxas das reações químicas aumentam exponencialmente com a temperatura, especialmente as reações de ramificação de cadeia que levam à autoignição. Com o aumento da temperatura da carga, menor tempo é necessário para as reações se completarem, o que aumenta a probabilidade da mistura não queimada atingir condições propícias para o surgimento de uma autoignição antes que a frente de chama principal consuma a carga. Dessa forma, qualquer medida que reduza a temperatura do gás que ainda não foi queimado no

cilindro reduzirá a tendência à detonação. Avanços de ignição mais adiantados acarretam em maiores pressões e temperaturas, aumentando as chances de ocorrer uma autoignição pós centelha. Utilizar avanços de ignição atrasados é uma medida muito efetiva para eliminar esse tipo de autoignição, porém vem às custas de redução de trabalho gerado, como foi discutido nos tópicos anteriores. Em geral as medidas são para reduzir a temperatura da carga que entra no cilindro, como por exemplo, reduzir o aquecimento da carga devido ao contato com os dutos de admissão, ou resfriamento da carga por meio de trocadores de calor. Entretanto, medidas que reduzam a temperatura da câmara de combustão também ajudam a reduzir a temperatura da mistura, por exemplo, galerias de arrefecimento mais eficientes, redução da quantidade de gás residual quente do ciclo anterior, reintrodução de gases residuais resfriados (devido a sua maior capacidade calorífica específica, que reduz a temperatura da chama durante a combustão) (FREELAND *et al.*, 2013).

Figura 2.17 – Principais fatores que afetam diretamente a propensão à detonação nos motores de combustão interna



Fonte: adaptado de FREELAND *et al.*, 2013

2.6.2 – Tempo disponível

Como as reações de autoignição requerem um tempo (sob condições propícias) até que a combustão ocorra efetivamente, qualquer medida que acelere a propagação da frente de chama principal resultará em menos tempo para que uma autoignição se apresente no restante dos gases que não foram ainda queimados. A redução do tempo de queima pode ser conseguida aumentando a turbulência do escoamento no cilindro. Além disso, o projeto de câmaras de combustão compactas, com correto posicionamento da vela de ignição ajudam a reduzir o caminho percorrido pela chama, assim como a utilização de mais de uma vela de

ignição. A relação ar-combustível também tem um impacto significativo na velocidade de propagação da chama. Misturas pobres possuem menores velocidades de propagação de chama e mais tempo para surgir uma autoignição. Conseqüentemente, boa parte da combustão acontece durante o tempo de expansão, com razão volumétrica de compressão reduzida, e produz gases de combustão com altas temperaturas. Isso leva a aumento de temperatura dos componentes do motor e aumenta a probabilidade de pré-ignição. Por outro lado, devido a menor expansão da mistura queimada, uma mistura pobre reduz a temperatura da mistura não queimada. Misturas ricas também tendem a reduzir a temperatura da carga no cilindro, uma vez que mais combustível líquido injetado significa que mais energia deverá ser fornecida pelo ar para vaporização do combustível, reduzindo mais a temperatura. (BAÊTA, 2006)

2.6.3 – Composição do combustível

O fenômeno da detonação é governado tanto por fatores do motor, quanto do combustível; a sua presença ou ausência em um motor depende primeiramente da qualidade anti-detonante do combustível. No Brasil, em 2016, a Gasolina C representou 32% (em volume) de todo combustível consumido (ANP, 2017). Atualmente ela é composta de 73% (em volume) de Gasolina A e 27% de Etanol anidro. Segundo Sharma (SHARMA, 1984), a gasolina é formada basicamente de carbono e hidrogênio combinados de várias maneiras em uma variedade de compostos. A maioria deles se enquadra nas cinco classes principais: 1- parafinas comuns, 2 - iso-parafinas, 3 - olefinas, 4 - naftenos e 5 - aromáticos.

Uma breve descrição de cada classe segundo Sharma (SHARMA, 1984) e a relação da estrutura molecular dentro de cada classe com a detonação, conforme descrito por Heywood (HEYWOOD, 1988) é da seguinte forma:

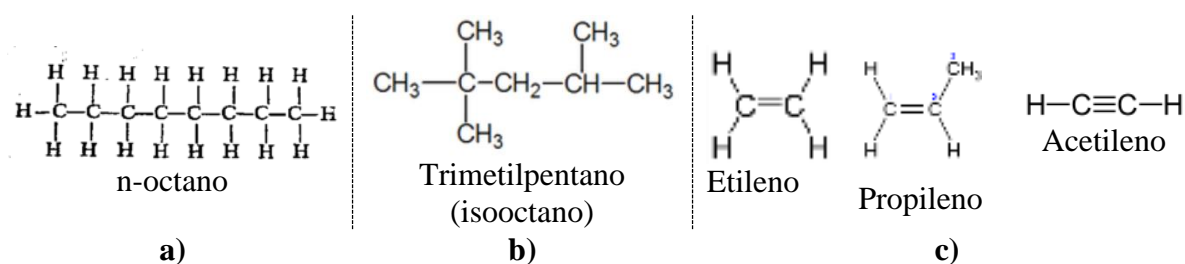
1. Parafinas comuns: recebem o sufixo “ano” (metano, etano, etc); o prefixo indica o número de átomos de carbono na molécula; possuem fórmula geral de $C_nH_{(2n+2)}$; o termo normal indica que a cadeia de carbono não possui ramificações, como pode ser visto no exemplo do n-octano da Figura 2.18 a). O ponto de ignição espontânea de hidrocarbonetos parafínicos é bem baixo.
 - a. Aumentando o tamanho da cadeia carbônica, aumenta a tendência à detonação (mais radicais CH_3 podem surgir).

- b. Compactar os átomos de carbono, ao aumentar as cadeias secundárias (reduzindo assim o tamanho da cadeia principal) reduz a tendência à detonação.
 - c. Adicionar grupos metílicos (CH_3) à cadeia principal de carbonos, no segundo a partir do fim ou até a posição central, reduz a tendência à detonação.
2. Iso-parafinas: são isômeros das parafinas comuns, a fórmula química é a mesma, porém o arranjo dos átomos é diferente. Para especificar um isômero utiliza-se nomenclatura mais precisa, por exemplo, 2,2,4-trimetilpentano: começa-se pelo fim, pentano indica 5 átomos de carbono na molécula de parafina; trimetil indica que tem três grupos metila ligados à cadeia nos carbonos das posições 2, 2 e 4, como pode ser visto na Figura 2.18 b). Trimetilpentano também é conhecido comumente como isooctano, embora existam outros isômeros do octano. As propriedades das isoparafinas assemelham-se as das parafinas comuns.
3. Olefinas: geralmente são nomeadas com sufixo “eno” (penteno, octeno, etc), possuem cadeias carbônicas diretas, porém com um ou mais átomos de carbono com ligação dupla entre eles. Dessa forma são hidrocarbonetos insaturados e a fórmula química é C_nH_{2n} ou $\text{C}_n\text{H}_{2n-1}$. Possuem boas características de combustão, uma vez que são oxidadas e polimerizadas facilmente.
 - a. A introdução de uma ligação dupla tem pouca influência no efeito anti-detonação; duas ou três ligações duplas, geralmente resultam em uma apreciável menor tendência à detonação. Exceções a essa regra são acetilenos (C_2H_2), etilenos (C_2H_4) e propilenos (C_3H_6) (mostrados na Figura 2.18 c)), os quais detonam muito mais facilmente do que os hidrocarbonetos saturados correspondentes.
4. Naftenos: são designados com termo “ciclo” no nome devido ao anel carbônico na molécula. Há apenas uma ligação simples de carbono-carbono no anel e possuem a fórmula C_nH_{2n} , mas são saturados. Não são encontrados normalmente em derivados leves do petróleo, mas sim em derivados pesados.
5. Aromáticos: possuem anel de benzeno na estrutura molecular (seis carbonos em anel com átomos alternados de carbono com ligação dupla). Isso deixa cada carbono com

uma única valência. Um aromático que possuiu um único átomo de hidrogênio no anel benzênico substituído por um grupo alquila normal (metil, etil, etc) é chamado de composto alquilbenzeno.

- Naftenos possuem uma significativa maior tendência à detonação do que os aromáticos de tamanhos correspondentes.
- A introdução de uma ligação dupla mostra pouco efeito antidetonante; duas e três ligações duplas, geralmente reduzem de forma apreciável a tendência à detonação.
- O aumento do comprimento das cadeias laterais ligadas a estruturas básicas do anel aumentam a tendência à detonação em ambos os grupos de combustível, enquanto a ramificação das cadeias laterais diminui a tendência à detonação.

Figura 2.18 – Exemplo de compostos a) parafínicos, b) isso-parafínicos e olefínicos.



Fonte: SHARMA, 1984

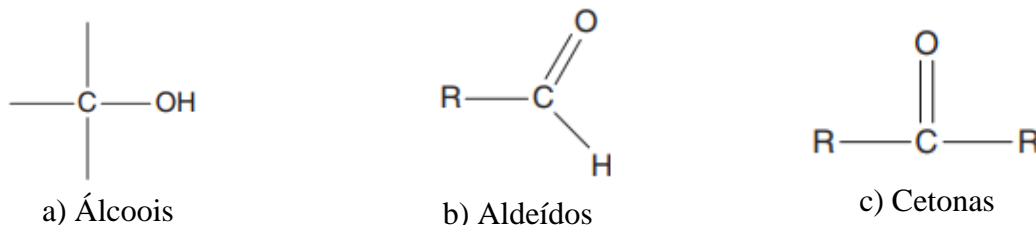
Outros compostos que não estão necessariamente presentes na gasolina, mas que também são utilizados como combustível (como o caso do Etanol) ou gerados durante a combustão de hidrocarbonetos são descritos por GLASSMAN, 2008:

- Álcoois: compostos orgânicos que possuem o grupo hidroxila (OH). O arranjo de ligações é mostrado na Figura 2.19 a).

O principal composto alcoólico, que é mais utilizado como combustível no Brasil, é o Etanol, seja ele anidro ou hidratado. O etanol forma uma mistura azeotrópica com a água (acima de 96% de etanol em volume) que não pode ser mais separado por processos físicos. Esse é chamado de etanol hidratado e é comercializado como produto acabado. O etanol anidro é obtido por meio de destilação azeotrópica, resultando em no mínimo 99,5% de pureza em volume de etanol, que é utilizado na composição da Gasolina C.

- Aldeídos: possuem o grupo funcional formila característico, como mostrado na Figura 2.19 b), na qual R é um radical orgânico.
- Cetonas: contém o grupo característico mostrado na Figura 2.19 c).

Figura 2.19 – Grupos funcionais dos álcoois, aldeídos e cetonas.



Fonte: GLASSMAN, 2008

Uma medida prática da resistência à detonação do combustível é o número de octanos (ON, do inglês *octane number*), o qual determina se um combustível irá detonar ou não em uma determinada condição de operação do motor - maior o número de octanos, maior a resistência à detonação. A escala do número de octanos é baseada em dois hidrocarbonetos que definem os finais da escala. Pela definição, o normal heptano ($n\text{-C}_7\text{H}_{16}$) tem o valor de zero e o isoctano (C_8H_{18}) tem o número de octanos de 100. O uso de combustíveis oxigenados (como álcool e éteres) como aditivos na gasolina tem se tornado cada vez mais comuns devido à suas excelentes propriedades antidetonantes, que aumentam a octanagem do combustível. O etanol, por exemplo, além de ter maior número de octanos do que a gasolina possui um maior calor latente de vaporização, cerca de três vezes o valor da gasolina (841 contra 360 kJ/kg, (LEE *et al.*, 2002)). Logo, ele tem uma maior capacidade de reduzir temperatura do ar que entra na câmara de combustão e reduz ainda mais a tendência à detonação do motor, o que muitas vezes é chamado de número de octanos efetivo.

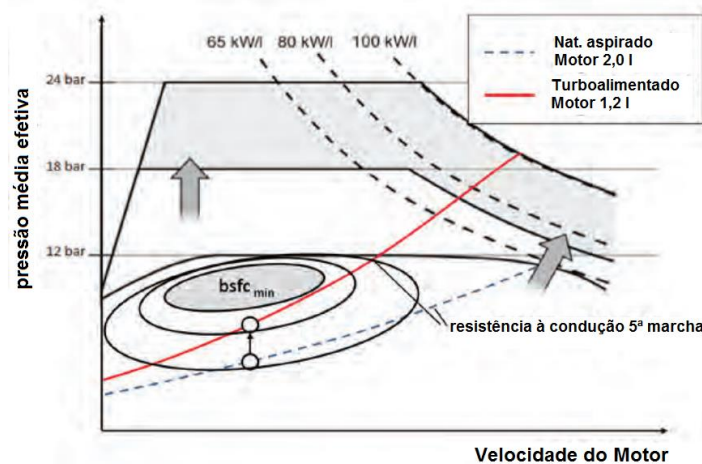
2.7 – Tecnologias para aumento de eficiência em motores

2.7.1 – Downsizing

A tecnologia *downsizing* se consiste em substituir um motor com uma cilindrada elevada por uma versão menor, que tenha menor volume deslocado, sem sofrer grande penalização no torque e potência. Isso leva a uma redução nas perdas por atrito, perdas térmicas e massa movimentada. Para tanto, mais massa de ar é introduzida e queimada junto com combustível nos cilindros, geralmente fazendo uso de um turbo compressor. A maior vantagem da

tecnologia *downsizing*, porém é a transição da operação em pontos de carga parcial, na qual se encontram em regiões de baixa eficiência nos motores “grandes”, para condições de plena carga em motores menores, as quais estão em regiões mais eficientes, como é mostrado na Figura 2.20, na qual a linha tracejada é um motor com volume deslocado de 2 litros naturalmente aspirado e a linha contínua mostra um motor sobrealimentado com volume deslocado de 1,2 litros.

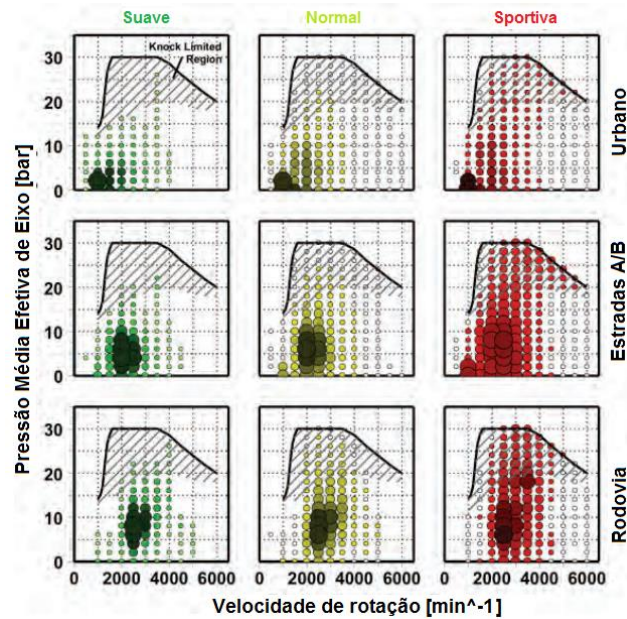
Figura 2.20 – Mudança de operação de carga do motor e potência específica causada pela tecnologia downsizing. A linha tracejada representa a região de operação de um motor naturalmente aspirado de 2,0 litros e a linha contínua de um motor turboalimentado de 1,2 litros.



Fonte: adaptado de ROTTENGRUBER, 2013

Neste caso, os componentes do motor devem ser preparados para um superaquecimento e efeitos de combustão anormal, especialmente da detonação. A Figura 2.21 mostra um mapa de permanência em cada ponto de operação de um motor *downsized* de um estudo conduzido pela MAHLE (FREELAND, 2013). Com base nesse estudo, é possível perceber que, até mesmo em condições de direção suave (sem grandes acelerações), a performance do motor é limitada pela detonação. Por esse motivo, os motores atuais que utilizam essa tecnologia devem aliar outras tecnologias que permitam trabalhar em condições mais críticas sem apresentar detonação, como é o caso da injeção direta de combustível (que é discutida na próxima seção) e até mesmo a injeção de água nos coletores de admissão. Nesse aspecto podemos citar os trabalhos de BAËTA *et al.* (2018 e 2015) que utilizam das vantagens do etanol brasileiro e da injeção de água para aumentar os limites de aplicação da tecnologia *downsizing*.

Figura 2.21 – Tempo de permanência em regiões do mapa de pressão média efetiva e velocidade de rotação do eixo do motor para diferentes trajetos e tipos de direção de um veículo com a tecnologia downsizing. A área hachurada representa a região em que o motor apresenta detonação.

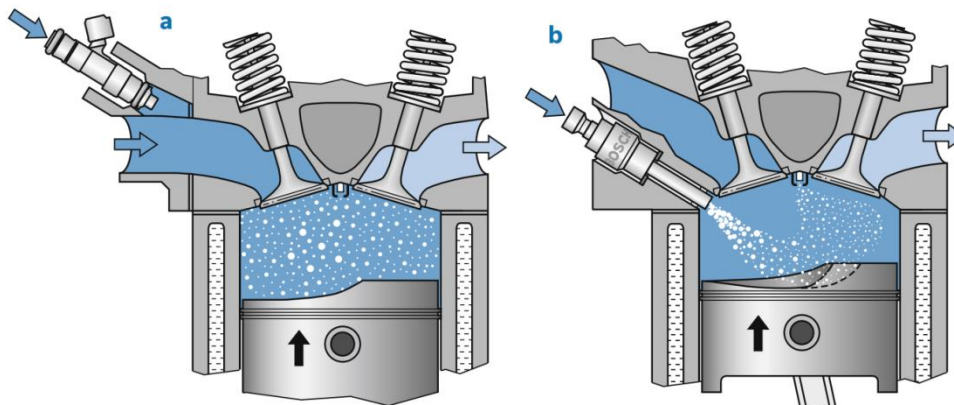


Fonte: adaptado de FREELAND, 2013

2.7.2 – Injeção direta de combustível e estratificação de carga

Nos motores convencionais, a injeção de combustível é feita no duto de admissão, próximo à válvula de admissão e são chamados da sigla em inglês de PFI (*port fuel injection*). Outro tipo de sistema de injeção existente é a injeção de combustível diretamente na câmara de combustão, chamado de injeção direta (do inglês *direct injection* - DI). A Figura 2.22 mostra um modelo esquemático dos dois tipos de sistemas de injeção.

Figura 2.22 – Desenho esquemático do modelo de a) injeção no duto de admissão (*port fuel injection, PFI*) e b) injeção direta de combustível na câmara de combustão.



Fonte: adaptado de REIF, 2015

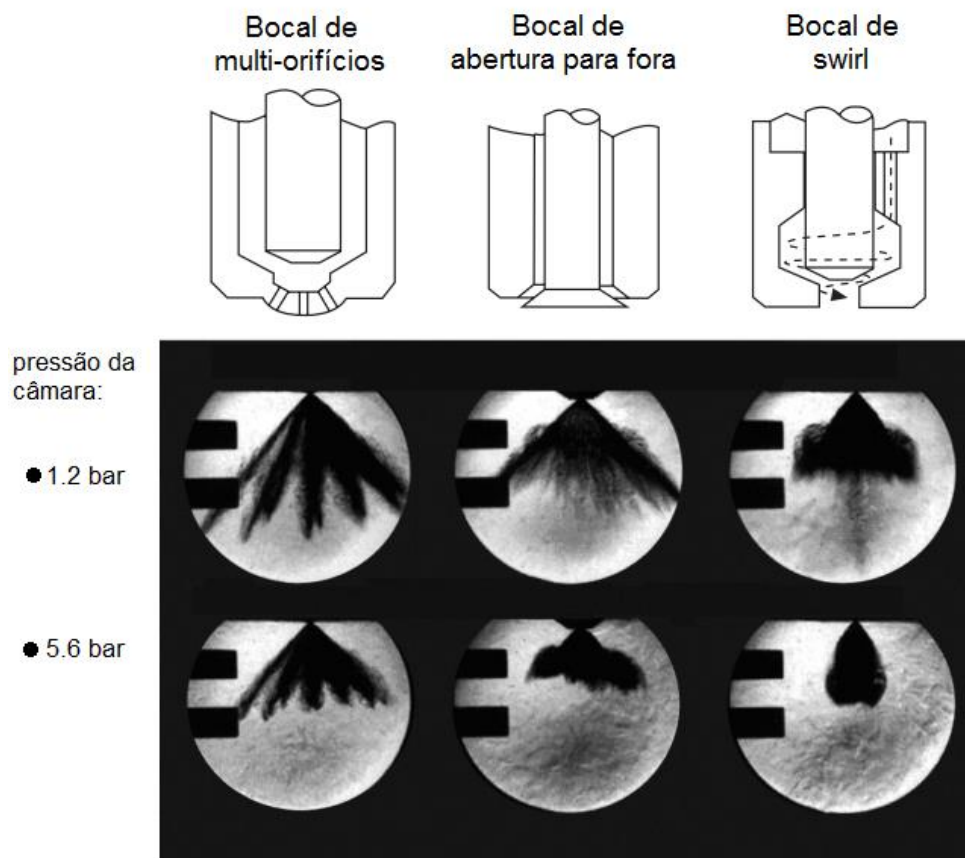
Segundo Zhao (ZHAO, 2010), os motores implementados com a tecnologia *downsizing*, geralmente possuem também injeção direta de combustível para aproveitar o efeito do resfriamento da carga no cilindro, reduzir a tendência à detonação e permitindo assim maiores relações de compressão. Além disso, a injeção direta permite realizar estratificação de mistura, na qual é criada uma região de mistura mais rica próximo à vela de ignição e no restante do cilindro uma mistura pobre. Isso permite que a chama se inicie devidamente na região rica, com o início da centelha, e consiga se propagar para o restante do cilindro com mistura pobre sem apresentar muitas instabilidades na combustão, permitindo que a razão ar combustível total do cilindro seja pobre para reduzir consumo de combustível. A estratificação de carga pode ser feita, por exemplo, através de duas injeções: uma durante o curso de admissão com uma quantidade inferior de combustível do que o necessário, para que se crie uma mistura pobre homogênea no cilindro; e outra injeção durante o curso de compressão, dessa forma não haverá tempo suficiente para homogeneização da carga até o início da combustão. Essa estratégia é geralmente utilizada em condição de carga parcial, na qual, ao invés de fazer o controle de carga com o fechamento da válvula de admissão e reduzir a pressão do gás que entra no cilindro (aumentando assim o trabalho de bombeamento), deixa-se a válvula borboleta aberta, mais ar entra no cilindro, porém menos combustível é injetado (com carga estratificada). Em plena carga, no entanto, mais energia é requerida, dessa forma utiliza-se a condição de mistura homogênea (ZHAO, 2010).

Existem, porém algumas desvantagens da injeção direta: a estratificação da carga pode levar a apagamento de chama, aumento de emissão de particulado e de óxidos nitrosos (NO_x). Motores com injeção direta podem produzir até dez vezes mais material particulado do que motores de injeção indireta e a estratificação de carga pode elevar esse número para 40 vezes mais do que na carga homogênea (ZHAO, 2010 e HEYWOOD, 1988). Além disso, alguns estudos identificaram os motores de injeção direta de gasolina como o principal responsável pela emissão de partículas ultrafinas na atmosfera. Essas partículas possuem diâmetro menor do que 100 micrometros e seu acúmulo no sistema respiratório aumenta o risco de desenvolver asma, inflamação pulmonar e efeitos cardiovasculares adversos e neurodegenerativos. (TAN *et al.*, 2016 E ERICSSON *et al.*, 2009).

Existem basicamente três tipos de injetores para injeção direta, conforme mostrado na Figura 2.23. O primeiro deles é o multi-orifícios, o qual produz vários sprays compactos com penetração relativamente grande. Sua grande vantagem é que o padrão do spray gerado não

muda com o aumento da pressão ambiente e praticamente qualquer configuração de spray é possível ser obtida através do número de furos, ângulo e posição adequados. Os outros dois tipos possuem único furo que produz um spray de cone oco. Sua vantagem em relação ao multi-orifícios é uma maior relação área-volume que leva a uma melhor atomização do combustível. O tipo com abertura para fora apresenta a vantagem de não mudar muito a estrutura do spray com o aumento da contra pressão do gás em comparação com o de abertura para dentro. A correta escolha do sistema de injeção e do tipo de injetor, portanto possuem um impacto significativo na performance e nas emissões de poluentes dos motores de combustão interna. (ZHAO, 2010). Um parâmetro utilizado para avaliar o diâmetro médio das gotas de um spray é o diâmetro médio de Sauter (SMD), que representa um diâmetro médio de todas as gotas do spray, ele é calculado como a relação entre o somatório de volume de todas as gotas pelo somatório de área superficial, tendo como unidade comprimento.

Figura 2.23 – Diferentes tipos de bocais injetores de combustível com os respectivos padrões de spray formados para duas condições de contra pressão 1,2 bar e 5,6 bar.



Fonte: ZHAO, 2010

2.8 – Modelos Computacionais

Nessa seção, as equações de conservação relevantes que foram utilizadas nos cálculos computacionais serão apresentadas, assim como as equações utilizadas na modelagem da turbulência, injeção de combustível e combustão. É válido ressaltar que o objetivo nessa etapa não é uma descrição detalhada de cada modelo, mas apenas evidenciar o método de cálculo e algumas particularidades dos modelos que podem conduzir a um ou a outro resultado. Para maior entendimento do método numérico, sugere-se a bibliografia de VERSENTEG MALALASEKERA, 2005, MALISKA, 2010, BAUMGARTEM, 2006.

2.8.1 – Fase Contínua

Nesta etapa do documento, quando não dito o contrário, a referência das equações apresentadas é diretamente o manual do CONVERGE (RICHARDS, 2017). A fase contínua é tratada com uma abordagem Euleriana e é composta por gases compressíveis nos motores de combustão interna. Ela é descrita pela conservação da massa e de *momentum*, mostradas com a forma compacta nas Equações (4) e (5).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = S_g \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + S_{c,i} \quad (5)$$

O tensor de tensões viscosas é dado pela Equação (6):

$$\sigma_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left(\mu' - \frac{2}{3} \mu_t \right) \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (6)$$

Nas equações acima, u é a velocidade, ρ é a densidade, S_g é o termo fonte de massa e S_c é o termo fonte de *momentum*, por exemplo, devido ao spray, P é a pressão, μ_t é a viscosidade turbulenta, μ' é a viscosidade de dilatação e δ_{ij} é o delta de Kronecker. A viscosidade turbulenta é calculada pela Equação (7):

$$\mu_t = \mu + C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (7)$$

no qual C_μ é uma constante do modelo de turbulência, k é a energia cinética turbulenta e ε é a dissipação turbulenta.

É necessário resolver as equações de conservação da massa e de momentum em conjunto para o cálculo do gradiente de pressão da equação de momentum, uma forma de realizar essa tarefa é através do algoritmo preditor-corretor PISO para acoplar pressão e velocidade. Além disso, uma equação de estado é necessária para relacionar a densidade, pressão e temperatura do gás. A equação de estado de Redlich-Kwong é mostrada na Equação (8):

$$P = \frac{RT}{v - \beta v_c} - \frac{\alpha \frac{p_c v_c^2}{\sqrt{T_r}}}{v^2 + \beta v_c v} \quad (8)$$

$$v_c = \frac{RT_c}{p_c} \quad (9)$$

v_c é o volume crítico (Equação (9)), T_c é a temperatura crítica, p_c é a pressão crítica, α representa as forças atrativas entre as moléculas e β representa o volume das moléculas, T_r é a temperatura reduzida e α e β são constantes dos modelos com valores de 0,42748 e 0,08664, respectivamente.

A equação da conservação de energia na forma compressível é mostrada na Equação (10):

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j e)}{\partial x_j} = -P \frac{\partial(u_j)}{\partial x_j} + \sigma_{ij} \frac{\partial(u_i)}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_t \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_t \sum_m h_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + S_e \quad (10)$$

no qual e é a energia interna específica, Y_m é a fração mássica da espécie m , D_t é o coeficiente de difusão turbulenta de massa, K_t é a condutividade turbulenta, h_m é a entalpia da espécie ' m ', T é a temperatura e S_e é o termo fonte de energia (seja por dissipação turbulenta, interação com spray ou combustão).

O transporte das espécies no domínio é resolvido pela Equação (11):

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \frac{\partial \rho_m u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_t \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + S_m \quad (11)$$

S_m é o termo fonte de densidade da espécie ‘m’ devido aos submodelos de evaporação e de combustão. O CONVERGE CFD também oferece a opção de calcular o coeficiente de difusão binário espécie por espécie para casos em que a turbulência não é expressiva. Em casos de escoamento turbulento, porém, o coeficiente de difusão de massa turbulento é muito maior que o coeficiente binário de difusão, não havendo necessidade de aumentar o gasto computacional para calculá-lo.

Para modelagem da turbulência, foi utilizada a abordagem das equações de Navier-Stokes por média de Reynolds, na qual as propriedades do escoamento são separadas em valores médios (denotados com o símbolo “barra” ex.: \bar{u}_i) e um termo de flutuação (denotado com índice “linha”, ex.: u'_i), como mostrado na Equação (12), utilizando como exemplo a velocidade:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (12)$$

Ao adicionar essa decomposição nas equações de conservação um termo adicional surge, chamado de tensões de Reynolds e mostrado na Equação (13):

$$\tau_{ij} = -\bar{\rho} \widetilde{u'_i u'_j} \quad (13)$$

o símbolo til \sim denota média de Favre, que é a média do produto densidade vezes a propriedade, dividida pela densidade média. Para resolver as tensões de Reynolds, o modelo RNG k- ϵ , que foi utilizado nesse trabalho, utiliza a correlação de Boussinesq, mostrada na Equação (14):

$$\tau_{ij} = -\bar{\rho} \widetilde{u'_i u'_j} = 2\mu_t S_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_i} \right) \quad (14)$$

a energia cinética turbulenta é definida como a metade do tensor de tensões (Equação (15)) e o tensor da taxa de deformação média, S_{ij} , é definido pela Equação (16):

$$k = \frac{1}{2} \widetilde{u'_i u'_i} \quad (15)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (16)$$

Equações de transporte adicionais são necessárias para obter a viscosidade turbulenta. A energia cinética turbulenta, k , e a dissipação de energia cinética turbulenta, ε , são calculadas pelas Equações de transportes (17) e (18).

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i k)}{\partial x_i} = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\mu}{Pr_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} - \rho \varepsilon + \frac{C_s}{1,5} S_s \quad (17)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i \varepsilon)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Pr_k} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{\varepsilon 3} \rho \varepsilon \frac{\partial(u_i)}{\partial x_i} + \left(C_{\varepsilon 1} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \tau_{ij} - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_s S_s \right) \frac{\varepsilon}{k} + S_t - \rho R \quad (18)$$

S_t é o termo fonte fornecido pelo usuário, S_s é o termo fonte que representa as interações com a fase discreta, $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, $C_{\varepsilon 3}$ e C_s são constantes do modelo e R é característico do modelo RNG e definido pela Equação (19), nas quais η_0 , β são constantes empíricas do modelo e η é expresso pela Equação (20).

$$R = \frac{C_\mu \eta^3 (1 - \eta/\eta_0) \varepsilon^2}{(1 + \beta \eta^3) k} \quad (19)$$

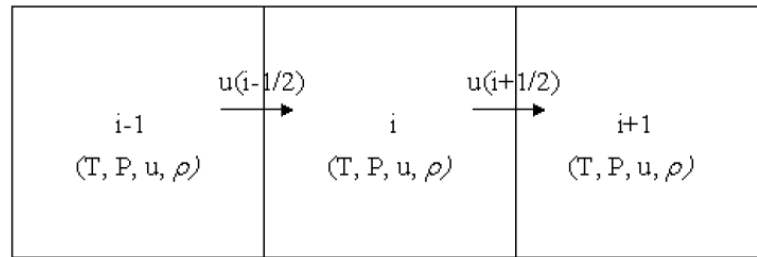
$$\eta = \frac{k}{\varepsilon} |S_{ij}| = \frac{k}{\varepsilon} \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \quad (20)$$

2.8.1.1 – Método dos Volumes Finitos

O método utilizado para solução das equações de conservação na forma integral é o método dos volumes finitos (MVF). Uma característica desse método é que as grandezas transportadas são conservadas para células com formato regular ou irregular. Porém, quanto maior o grau de deformação das células (não ortogonalidade) maior será o erro no cálculo do fluxo devido à difusão cruzada.

A primeira etapa do método é a geração da malha, que se consiste em dividir o domínio computacional em volumes de controle discretos (células). No CONVERGE CFD, por exemplo, as variáveis escalares são armazenadas no centro de cada volume de controle e as variáveis de fluxo são interpoladas para a face da célula. Considerando, por exemplo, o simples domínio computacional de três células mostrado na Figura 2.24 e a Equação de transporte (21).

Figura 2.24 – Domínio simplificado contendo três células para exemplo de cálculo de termo convectivo.



Fonte: RICHARDS, 2017

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial u\phi}{\partial x} = 0 \quad (21)$$

A Equação (21) pode ser escrita na forma integral como mostrado na Equação (22), com V sendo o volume da célula e A a área superficial e n a normal da superfície.

$$\frac{d}{dt} \int_V \phi dV + \int_A u \cdot n \phi dA = 0 \quad (22)$$

Para a discretização do termo convectivo e cálculo do fluxo convectivo entre as fronteiras das células duas opções muito utilizadas são o de diferenças centradas, o qual é uma média entre os valores das duas células adjacentes, conforme mostrado nas Equações (23) e (24):

$$\phi_{i+1/2} = \frac{1}{2} \phi_i + \frac{1}{2} \phi_{i+1} \quad (23)$$

$$\phi_{i-1/2} = \frac{1}{2} \phi_i + \frac{1}{2} \phi_{i-1} \quad (24)$$

Ou o método *upwind*, no qual a direção da velocidade é levada em consideração e o valor convectivo da variável é dado como igual ao do nó da célula a montante do escoamento, que, para o exemplo mostrado Figura 2.24, seria conforme as Equações (25) (26):

$$\phi_{i+1/2} = \phi_i \quad (25)$$

$$\phi_{i-1/2} = \phi_{i-1} \quad (26)$$

Pode-se também utilizar um esquema híbrido entre diferenças centradas e *upwind*. Como as propriedades escalares são armazenadas nos nós de cada célula e a velocidade é necessária nas faces das células, o desacoplamento pressão velocidade é necessário. Um método de se fazer isso é utilizando o algoritmo de Rhie-Chow para interpolação e evitar oscilações no campo de pressão e velocidade. Nele, a velocidade na face é obtida pela Equação (27):

$$u_{i+1/2}^* = \frac{u_i^* + u_{i+1}^*}{2} - \frac{dt}{\rho} \left(\frac{P_{i+1} - P_i}{dx} \right) + \frac{dt}{2\rho} \left(\frac{P_{i+1} - P_{i-1}}{2dx} + \frac{P_{i+2} - P_i}{2dx} \right) \quad (27)$$

$u_{i+1/2}^*$ é a velocidade atualizada para a pressão na face entre os nós i e $i+1$ e P_i é a pressão no nó i .

2.8.1.2 – Número de Courant-Friedrichs-Lewy

O número de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) é uma estimativa de quantas células uma grandeza irá atravessar em um dado passo de tempo. O número de CFL pode ser calculado considerando termo convectivo (cfl_u), velocidade do som (cfl_{mach}) e termo difusivo (cfl_v), como mostrado nas Equações (28), (29) e (30):

$$cfl_u = u \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (28)$$

$$cfl_{mach} = c \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (29)$$

$$cfl_v = v \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (30)$$

No qual Δx é o espaçamento da malha, Δt é o passo de tempo, u é a velocidade, c é a velocidade do som e v é a viscosidade. Esse parâmetro é relevante, uma vez que o converge utiliza uma rotina de passo de tempo variável, no qual o usuário define um CFL máximo e o passo de tempo é alterado de forma a não ultrapassar esse limite.

2.8.1.3 – Controle de malha

O converge oferece dois tipos principais de refinamento de malha: o refinamento fixo e o adaptativo. O refinamento fixo é utilizado em regiões específicas do cilindro que seja de

interesse do usuário. Ele possui várias opções de volumes predefinidos que se deseja refinar, como por exemplo, um refinamento com formato de esfera na região dos eletrodos da vela de ignição durante o período em que a ignição acontece. O usuário escolhe o nível do refinamento necessário ($embed_scale$), que é feito em cima do tamanho base da malha do domínio (dx_base), e o tamanho da célula de região refinada (dx_{embed}) é calculado com a Equação (31):

$$dx_{embed} = \frac{dx_base}{2^{embed_scale}} \quad (31)$$

Sendo que o nível de refinamento escolhido deve ser um número inteiro. Dessa forma, se um nível de refinamento de “2” for escolhido, o tamanho base da malha será dividido por 4, por exemplo. O refinamento adaptativo (AMR, do inglês *adaptive mesh refinement*) é feito com base em condições flutuantes e móveis, como temperatura ou velocidade. Teoricamente, um bom algoritmo de refinamento adaptativo adicionará maior resolução de malha (refinamento) nas regiões do campo de escoamento que estão mais sub-resolvidas, ou seja, quando a variável varia muito dentro do volume de cálculo da célula. Para quantificar a parcela que não está sendo calculada devido ao tamanho da malha não estar compatível com a variação da grandeza em interesse (campo *sub-grid*), o método AMR estima a magnitude do campo *sub-grid* para determinar onde será refinado. Para um escalar, o campo *sub-grid* é definido como a diferença entre o campo atual (ϕ) e o campo resolvido (calculado) ($\bar{\phi}$), conforme mostrado na Equação (32):

$$\phi' = \phi - \bar{\phi} \quad (32)$$

O campo *sub-grid* pode ser aproximado ao primeiro termo (de segunda ordem) de uma série infinita, como mostra a Equação (33).

$$\phi' \cong -\alpha_{[k]} \frac{\partial^2 \bar{\phi}}{\partial x_k \partial x_k} \quad (33)$$

sendo $\alpha_{[k]}$ igual a $dx_k^2/24$ para uma célula retangular e o parêntese indica que não há somatório. Uma célula é refinada se o valor absoluto do campo sub-grid for maior do que o especificado pelo usuário e de forma análoga ocorre para o “engrossamento” da malha: se o

termo *sub-grid* for menor que um quinto do especificado, a malha volta para o nível de refinamento anterior. O refinamento é feito de acordo com a Equação (34), na qual *amr_embed_scale* é o nível de refinamento definido pelo usuário, dx_{AMR} é o tamanho da malha refinada pelo AMR:

$$dx_{AMR} = \frac{dx_base}{2^{amr_embed_scale}} \quad (34)$$

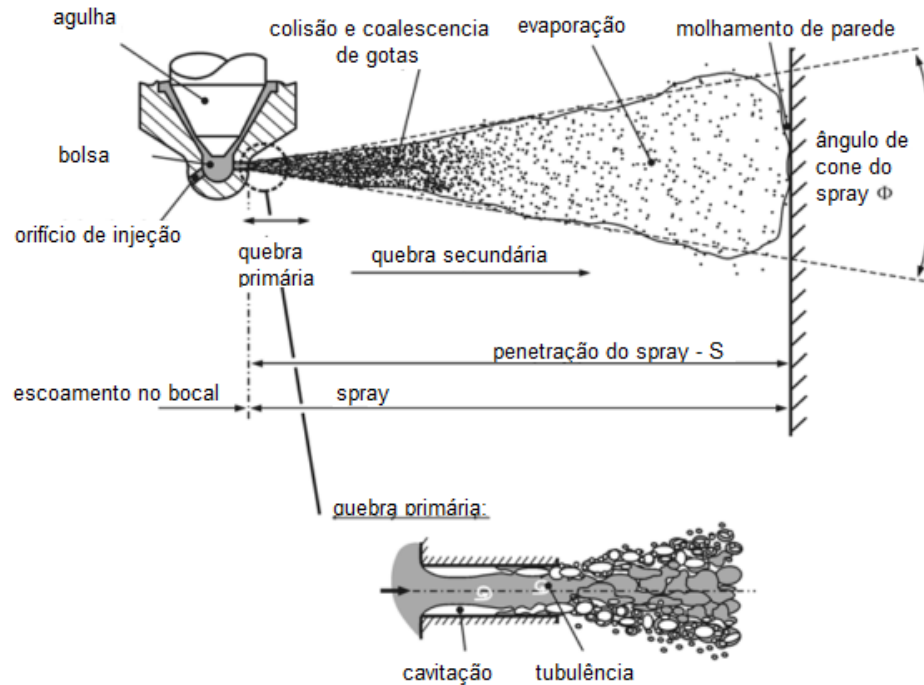
O valor calculado de ϕ' é comparado com um definido pelo usuário ϕ'_{sgc} , que possui valores típicos de 0,1% a 10% de um valor característico da variável.

2.8.2 – Fase Dispersa

A abordagem Lagrangiana é utilizada para solução das equações de conservação em cada parcela de spray introduzida no domínio para modelagem da injeção de combustível. Cada parcela representa um conjunto de gotas que possuem características idênticas (por exemplo, raio, velocidade, temperatura, etc.) com o objetivo de reduzir custo computacional de uma simulação. Uma gota de um spray passa por diversos processos desde quando é injetada até evaporar e, para modelar cada processo, vários submodelos são utilizados, como por exemplo, o de deformação e arrasto, quebra, evaporação e interação com parede.

Os regimes de quebra que um spray sofre são mostrados na Figura 2.25. Segundo Baumgarten (BAUMGARTEN, 2006), a primeira quebra, que é do jato líquido em gotas, acontece logo na saída do orifício do injetor e é causada pela cavitação e turbulência no interior do injetor. A quebra secundária é a desintegração das gotas existentes em gotas menores em virtude das forças aerodinâmicas (forças de pressão e forças de arrasto). Essas forças são induzidas pelo movimento relativo entre a gota e o ar ambiente, o qual ela está inserida, produzindo instabilidades na superfície da gota ou nela como um todo que leva a uma eventual desintegração. A tensão superficial da gota, por outro lado, tem o caráter de manter a gota coesa e neutralizar as instabilidades.

Figura 2.25 – Processos sofridos pela injeção de um jato líquido por um orifício: formação do spray, quebra primária das gotas, colisão e coalescência de gotas, evaporação de gotas, quebra secundária e contanto com a parede. Definição esquemática de penetração do spray e ângulo de cone.



Fonte: adaptado de BAUMGARTEN, 2006

As gotas que estão na ponta do spray sofrem uma desaceleração maior do que as gotas que seguem seus rastros, dessa forma, elas são continuamente substituídas por novas gotas e a penetração do spray aumenta. As velocidades do Spray são máximas no eixo de injeção e diminuem na direção radial devido à interação com o gás. A colisão das gotas pode resultar em uma mudança de velocidade e tamanho, uma vez que elas podem se juntar (coalescência) ou se quebrarem em gotas menores. Quanto maior a penetração menor é a energia das gotas da ponta do Spray e menor é a velocidade da ponta do Spray. A formação de filmes líquidos geralmente influencia negativamente na formação de emissões uma vez que evaporam mais devagar e são parcialmente queimados na combustão. (BAUMGARTEN, 2006).

Na modelagem do spray do combustível, a composição do líquido a ser injetado deve ser especificada, dessa forma, cada parcela introduzida no domínio terá essa mesma composição. Além disso, o tempo de injeção, a taxa de injeção no tempo, a massa total injetada e a pressão de injeção devem ser conhecidas. Dessa forma é possível calcular a velocidade de injeção teórica, V_{inj_teo} , considerando toda área do orifício para escoamento (Equação (35)), e em

seguida, o coeficiente de descarga do orifício (Cd_{inj}), pela Equação (36) e a velocidade real de injeção (V_{inj_real}), considerando a contração da área A_{inj} , com base na Equação (37):

$$V_{inj_teo} = \frac{m}{\rho \cdot A_{inj} \cdot dt} \quad (35)$$

$$Cd_{inj}^2 = \frac{1}{2} \rho \frac{V_{inj_teo}^2}{P_{inj}} \quad (36)$$

$$V_{inj_real} = \frac{V_{inj_teo}}{Cd_{inj}} \quad (37)$$

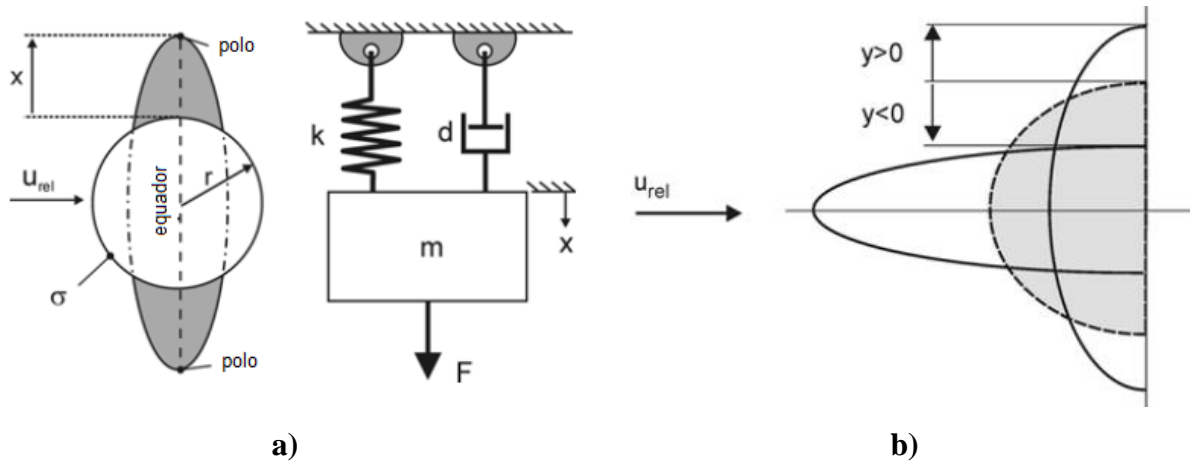
Para modelar a quebra primária do spray será utilizado o método de *blob* desenvolvido por Reitz e Diwakar (REITZ e DIWAKAR, 1987). Ele se baseia em considerar que o jato líquido já está quebrado em gotas quando entra no domínio computacional. Dessa forma, gotas com diâmetro igual ao diâmetro equivalente do orifício do injetor (já considerando o coeficiente de contração de área, relacionado com o coeficiente de descarga do orifício) são introduzidas no domínio. Para isso, deve-se conhecer a direção e o ângulo de cone de cada jato do injetor.

2.8.2.1 – Modelo de arrasto

O modelo de arrasto de TAB (*Taylor Analogy Breakup model*) determina o coeficiente de arrasto da gota dinamicamente, levando em consideração variações do formato da gota em função de parâmetros de distorção. Conforme descrito por Baumgarten (BAUMGARTEN, 2006), ele se baseia entre uma analogia entre a força oscilante em um sistema massa-mola com a força oscilante em uma gota que penetra em um gás com velocidade relativa. Pela analogia, a força restauradora da mola corresponde à tensão superficial da gota, a qual tenta mantê-la esférica; a força de amortecimento corresponde à força de atrito dentro da gota em virtude da viscosidade dinâmica do líquido μ_l – A Figura 2.26 -a mostra a analogia do modelo TAB. Utilizando um deslocamento adimensional ‘y’, mostrado na Figura 2.26-b, a equação do movimento é dada pela Equação (38), na qual C_F , C_b , C_k e C_d são constantes do modelo, r é o raio da gota e o índice $\dot{}$ denota derivada no tempo.

$$\ddot{y} = \frac{C_F \rho_g u_{rel}^2}{C_b \rho_l r^2} - \frac{C_k \sigma}{\rho_l r^3} y - C_d \frac{\mu_l}{\rho_l r^2} \dot{y} \quad (38)$$

Figura 2.26 - a) Analogia do modelo de quebra de Taylor Breakup model (TAB) com um sistema massa mola; b) Definição do deslocamento adimensional ‘y’ ao longo de um eixo da gota: quando y=0 tem-se a geometria esférica da gota e quando y=1, a do disco.



Fonte: adaptado de BAUMGARTEN, 2006

O coeficiente de arrasto de uma gota esférica é dado pela Equação (39).

$$C_{D,esfera} = \begin{cases} 0,424 & Re > 1000 \\ \frac{24}{Re} \left(1 + \frac{1}{6} Re^{2/3} \right) & Re \leq 1000 \end{cases} \quad (39)$$

Ao utilizar a deformação da gota pelo modelo TAB, o coeficiente de arrasto é calculado finalmente pela Equação (40).

$$C_D = C_{D,esfera} (1 + 2,632y) \quad (40)$$

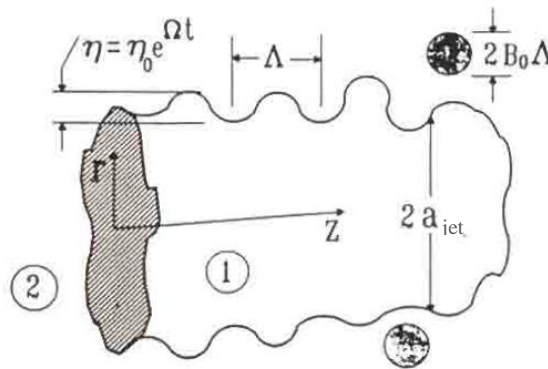
O coeficiente de arrasto é mínimo para \$y=0\$, o seja, que é o da própria esfera, e máximo para \$y=1\$, que é referente à geometria do disco.

2.8.2.2 – Quebra secundária de gota

A quebra secundária é calculada com base no modelo combinado de Kelvin-Helmholtz e Rayleigh-Taylor (KH-RT). O modelo quebra de Kelvin-Helmholtz (KH) foi proposto por Reitz (REITZ, 1987) e se baseia nas instabilidades causadas na superfície de um líquido que penetra em um gás com velocidade relativa devido às forças de cisalhamento e aerodinâmicas (instabilidades de Kelvin-Helmholtz). Essas instabilidades crescem na superfície da gota até

que haja a quebra da mesma em gotas menores. A Figura 2.27, ilustra o mecanismo de quebra do modelo KH, na qual a região 2, representa o gás e a região 1, o líquido; η é o deslocamento axisimétrico, a_{jet} é o raio do cilindro de líquido, η_0 é a perturbação infinitesimal inicial, Ω é a frequência e Λ é a amplitude da onda de crescimento mais rápido.

Figura 2.27 – Desenho esquemático do crescimento das instabilidades de Kelvin-Helmholtz na superfície de um jato líquido penetrando um ambiente gasoso.



Fonte: REITZ, 1987

A taxa de variação do raio da gota e o tamanho da gota resultante estão relacionados à frequência Ω e ao comprimento de onda Λ da onda de crescimento mais rápido na superfície. Nesse modelo, a gota original, também chamada de gota pai, não sofre uma completa desintegração, mas perde massa continuamente na medida em que vai penetrando o gás. Isso resulta em uma redução no raio em um intervalo de tempo que depende do raio da gota pai, do raio da gota gerada e de um tempo característico. A equação (41) mostra a taxa de variação no raio da gota (r), a Equação (42) o tempo de quebra e a Equação (43), o raio da gota gerada.

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{a_{jet} - r}{\tau} \quad (41)$$

$$\tau = 3,726 B_1 a_{jet} / \Lambda \Omega \quad (42)$$

$$r = B_0 \Lambda \quad (43)$$

Como no método de *blob* os efeitos de cavitação e turbulência dentro do orifício do injetor não são levados em consideração, a constante B_1 no modelo de quebra KH é ajustável para considerar esses efeitos na quebra secundária. Maiores valores de B_1 acarretam em um spray com quebra reduzida e maior penetração. Valores de B_1 entre 1,73 a 60 são encontrados na

literatura (BAUMGARTEN, 2006). B_0 é uma constante do modelo com valor fixo de 0,61. A frequência Ω e o comprimento de onda Λ da onda de crescimento mais rápido são definidos pelas Equações (44) e (45):

$$\Lambda = 9,02a_{jet} \frac{(1 + 0,45Z^{0,5})(1 + 0,4T^{0,7})}{(1 + 0,865We_g^{1,67})^{0,6}} \quad (44)$$

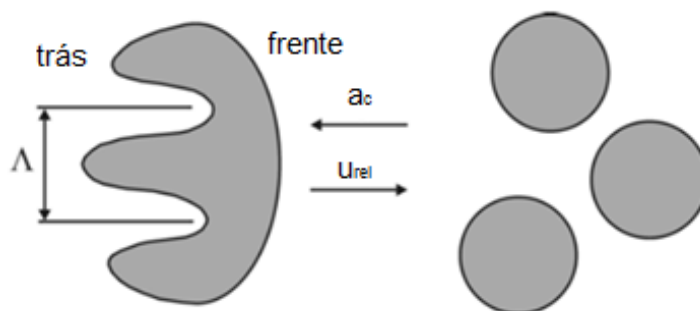
$$\Omega \left[\frac{\rho_l a_{jet}^3}{\sigma} \right]^{0,5} = \frac{(0,34 + 0,385We_g^{1,5})}{(1 + Z)(1 + 1,4T^{0,6})} \quad (45)$$

Z , T , We_g , We_l , são os números de Ohnesorge, Taylor, Webber do gás e do líquido, respectivamente: $Z = \frac{\sqrt{We_l}}{Re_l}$ $T = Z\sqrt{We_g}$ $We_g = \frac{\rho_g a u_{rel}^2}{\sigma}$ $We_l = \frac{\rho_l a u_{rel}}{\eta_l}$ e σ é a tensão superficial do líquido.

Quando a quebra acontece, fragmentos da gota original são removidos. Novas parcelas são criadas quando os fragmentos acumulam uma quantidade de massa suficiente. A fração da gota original que será removida na quebra é determinada no modelo, assim como a quantidade de massa para a criação da nova parcela.

O modelo de Rayleigh-Taylor (RT) é baseado na instabilidade causada na interface entre dois fluidos de densidades diferentes com aceleração normal. A instabilidade cresce na parte de trás de uma gota (que se move com velocidade relativa a um gás ambiente) e eventualmente a desintegração da gota em gotas menores ocorre (como é mostrado na Figura 2.28).

Figura 2.28 – Ilustração do processo de quebra segundo o modelo de Rayleigh-Taylor. As instabilidades na superfície da gota começam a crescer devido à aceleração normal da gota líquida em outro fluido com massa específica diferente.



Fonte: adaptado de BAUMGARTEN, 2006

A gota é desacelerada pela força de arrasto aerodinâmico e a aceleração normal à interface a_c pode ser obtida ao dividir a força de arrasto pela massa da gota, como mostrado na Equação (46).

$$|a_{c,i}| = \frac{F_{D,i}}{M_d} = \frac{3}{8} C_D \frac{\rho_g |u_{rel,i}|^2}{\rho_l r_0} \quad (46)$$

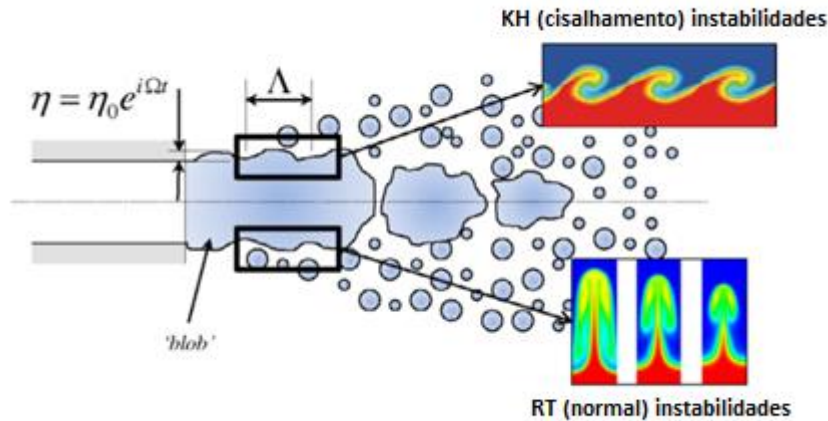
no qual $F_{D,i}$ é a força de arrasto no parcel 'i', M_d é a massa da gota, C_D é o coeficiente de arrasto, ρ_g é a densidade do gás, ρ_l é a densidade do líquido, r_0 é o raio da gota original e $u_{rel,i}$ é a velocidade relativa entre a gota e o gás. Segundo Baumgarten (BAUMGARTEN, 2006), a taxa de crescimento Ω e seu comprimento de onda Λ da onda de crescimento mais rápido das instabilidades são dados pelas Equações (47) e (48).

$$\Omega = \sqrt{\frac{2}{3\sqrt{3}\sigma} \frac{[a_c(\rho_l - \rho_g)]^{3/2}}{\rho_l + \rho_g}} \quad (47)$$

$$\Lambda = C_3 2\pi \sqrt{\frac{3\sigma}{a_{jet}(\rho_l - \rho_g)}} \quad (48)$$

O comprimento de onda correspondente à onda de crescimento mais rápido é comparado ao diâmetro da gota e, se ele for menor, é assumido que a onda cresce na superfície da gota. Após o início do crescimento da onda, o tempo é rastreado e quando atinge $\tau = C_\tau/\Omega^{-1}$, a gota se desintegra em gotas menores de raio $r = \Lambda$. A constante C_3 é introduzida para permitir o ajuste do comprimento de onda e, assim como a constante B_1 do modelo KH, ela introduz os efeitos da turbulência e cavitação dentro do bocal do injetor na quebra secundária. Ao aumentar esse valor a quebra é reduzida (a quebra só é permitida se $\Lambda < r$) e o tamanho das novas gotas é aumentado. Patterson e Reitz (PATTERSON E REITZ, 1998) utilizaram valores na faixa de 1,0 a 5,33 (BAUMGARTEN, 2006). No CONVERGE CFD, a quebra é determinada pela multiplicação de $\Lambda * C_{3_converge}$, ou seja, a constante $C_{3_converge}$ é o inverso da C_3 definida na equação anterior e seu valor sugerido varia de 0,1 a 1,0 ($1 \leq C_3 \leq 10$). A constante C_τ geralmente é igual a 1, mas também permite ajuste para uma quebra mais rápida ou devagar.

Figura 2.29 – Processos de quebra combinados dos modelo KH-RT: crescimento de instabilidades do modelo KH: cisalhamento entre os fluidos; RT: aceleração normal entre fluidos com diferentes massas específicas.



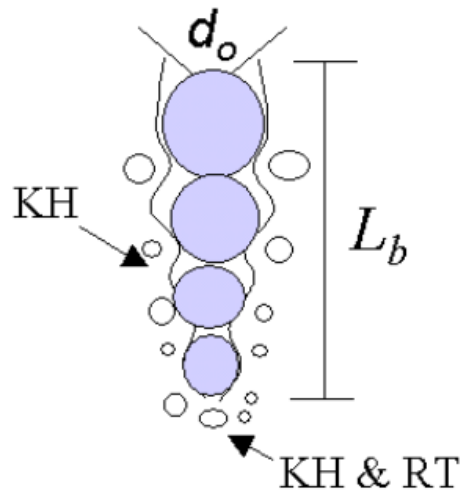
Fonte: PERINI E REITZ (2016)

Ao se utilizar os modelos combinados KH e RT, eles são implementados nos códigos CFD em um modo competitivo. Na Figura 2.29, é possível perceber a instabilidade de KH (baseada no cisalhamento) e a de RT (baseada na aceleração normal). Ambos são permitidos crescerem ondas instáveis simultaneamente e, se o modelo RT prever uma quebra no passo de tempo atual, a desintegração da gota toda ocorre segundo o mecanismo RT. Pelo contrário, o modelo KH produz gotas filhas com diâmetro menores que o diâmetro das gotas pais. Entretanto, a redução do tamanho das gotas pelo método RT é muito rápida se for aplicado nas gotas que acabaram de sair do orifício do injetor. Dessa forma, esse modelo de quebra pode ser aplicado somente a certa distância do orifício: a distância de quebra L_b do núcleo denso, conforme introduzido por BEALE E REITZ (1999) e mostrada na Equação (49).

$$L_b = C_b \sqrt{\frac{\pi d_{inj}^2 \rho_l}{4 \rho_g}} \quad (49)$$

C_b é uma outra constante de ajuste do modelo. Segundo Senecal (SENECAL, 2000), para casos em que o número de Webber do gás é muito alto (caso de motores Diesel) a constante C_b pode ser definida em termos da constante B1 do modelo KH ($C_b = B1/2$). A Figura 2.30 ilustra a ativação do modelo RT após a distância L_b .

Figura 2.30 – Definição do comprimento L_b para ativação do modelo RT no modelo combinado KH-RT.



Fonte: RICHARDS, 2017

2.8.2.3 – Modelo de evaporação

Como modelo de evaporação foi utilizada a correlação de Frossling da variação do raio da gota. A taxa de variação do raio no tempo é calculada pela (50) (AMSDEN, 1989).

$$\frac{dr_0}{dt} = -\frac{\rho_g D}{2\rho_l r_0} B_d Sh_d \quad (50)$$

No qual D é a difusividade de massa do vapor líquido no ar, B_d representa o número de Spalding para a gota, mostrado na Equação (51):

$$B_d = \frac{Y_1^* - Y_1}{1 - Y_1^*} \quad (51)$$

Y_1^* é a fração mássica de vapor na superfície da gota, Y_1 é a fração mássica de vapor e Sh_d é o número de Sherwood (adimensional que representa a razão de transferência de massa convectiva e difusiva – ele é uma analogia da transferência de calor para o número de Nusselt, mas para transferência de massa (INCROPERA, 2000)), dado com base no número de Reynolds, Re_d , e no número de Schmidt, Sc (Equações (52), (53) e (54), respectivamente).

$$Sh_d = (2.0 + 0.6Re_d^{1/2} Sc^{1/3}) \frac{\ln(1 + B_d)}{B_d} \quad (52)$$

$$Re_d = \frac{\rho_{gas} |u_i + u_i - v_i^1| d}{\mu_{air}} \quad (53)$$

$$Sc = \mu_{air} / \rho_{gas} \quad (54)$$

d é o diâmetro da gota e μ_{air} é a viscosidade do ar, a qual é calculada pela temperatura \hat{T} , dada pela Equação (55).

$$\hat{T} = \frac{T_{gas} + 2T_d}{3} \quad (55)$$

T_{gas} é a temperatura do gás e T_d é a temperatura da gota. A difusividade mássica, D , é determinada pela Equação (56) (AMSDEN, 1989).

$$\rho_{gas} D = 1,293 D_0 (\hat{T}/273)^{n_0-1} \quad (56)$$

D_0 e n_0 são constantes do modelo determinadas experimentalmente que variam de combustível para combustível. Além disso, Y_1^* é determinado pela Equação (57):

$$Y_1^* = \frac{M_{C_nH_{2m}}}{M_{C_nH_{2m}} + M_{mix} \left(\frac{\rho_{gas}}{\rho_v} - 1 \right)} \quad (57)$$

M_{mix} é o peso molecular da mistura (sem incluir vapor de líquido das espécies), ρ_{gas} é a densidade do gás, ρ_v é a pressão de vapor na temperatura atual da gota.

A temperatura da gota é considerada constante em função do raio da gota, dessa forma a energia conduzida em uma gota irá aquecê-la ou fornecer energia para a evaporação, conforme descrito pelo balanço de energia da Equação (58).

$$\overline{A}_d Q_d = c_l m_d^* \frac{dT_d}{dt} - \frac{dm_d}{dt} H_{vap} \quad (58)$$

em que c_l é o calor específico do líquido e T_d é a temperatura da gota, m_d^* é a massa da gota e H_{vap} é o calor latente de vaporização calculado na temperatura da gota. A taxa de condução

de calor na superfície da gota por unidade de área é dada pela correlação de Ranz-Marshall, mostrada na Equação (59).

$$Q_d = \frac{Nu_d k_{air} (T_{gas} - T_d)}{\bar{d}_0} \quad (59)$$

Sendo o número de Nusselt dado pela correlação empírica mostrada na Equação (60).

$$Nu_d = (2,0 \pm 0,6 Re_d^{1/2} Pr_d^{1/3}) \frac{\ln(1 + B_d)}{B_d} \quad (60)$$

k_{air} é a condutividade do ar calculada na temperatura \hat{T} , T_{gas} é a temperatura do gás e Pr_d é o número de Prandtl. Além disso, \bar{A}_d e \bar{d}_0 são a área e o diâmetro médio da gota, respectivamente e, m_d é um valor intermediário da massa da gota, e são mostrados nas Equações (61), (62) e (63), respectivamente.

$$\bar{A}_d = \frac{\pi(r_0^{*2} + r_0^2)}{2} \quad (61)$$

$$\bar{d}_0 = \frac{2r_0^* + 2r_0}{2} \quad (62)$$

$$m_d^* = \rho_l \frac{4}{3} \pi r_0^3 \quad (63)$$

no qual r_0^* é um valor intermediário do raio da gota, calculado pela correlação de Frossling. Uma vez que o valor da temperatura da gota T_d é obtido, utiliza-se a correlação de Frossling para calcular o raio da gota. Essa variação do raio da gota é utilizada para determinar a quantidade de vapor adicionado à célula computacional.

2.8.2.4 – Dispersão turbulenta

Os efeitos do escoamento turbulento nas gotas do spray são modelados com a adição de um termo de flutuação de velocidade u'_i na velocidade do gás u_i . Na modelagem da turbulência utilizando modelos RANS um termo fonte, S_s , é incluído nas equações de dissipação de energia cinética turbulenta para contabilizar o trabalho gasto para dispersar as gotas do spray.

Nele aparece a flutuação nas componentes da velocidade u'_i e a flutuação da força de arrasto na gota F'_{drag} , mostrada na Equação (64).

$$F'_{drag,i} = \frac{F_{drag,i}}{(u_i + u'_i - v_i)} u'_i \quad (64)$$

No modelo de O'Rourke de dispersão turbulenta, cada componente de u'_i é distribuída de acordo com uma função Gaussiana.

2.8.2.5 – Interação da gota com a parede

Para modelar a interação da gota com a parede foi utilizado o modelo de formação de filme líquido, *splash* de uma gota em uma poça de filme e de remoção de filme líquido. A espessura do filme (h) é calculada de acordo com o volume (V_p) de todas as gotas na célula que colidiram com a parede em um dado passo de tempo e na projeção da área superficial delas (A_i), pela Equação (65).

$$h = \frac{\sum_p V_p}{|A_i|} \quad (65)$$

O transporte de filme é calculado com base na Equação de *momentum* de filme líquido de O'ROURKE E AMSDEN (2000). Como modelo de *splash* de filme pode-se citar o modelo de O'Rourke e Amsden, no qual o critério para ocorrer o *splash* é dado pela Equação (66):

$$E^2 = \frac{We_i}{\min\left(\frac{h}{d}, 1\right) + \frac{\delta}{d}} > E_{crit}^2 \quad (66)$$

We_i é o número de Weber da gota, d é o diâmetro da gota que atinge o filme e a espessura da camada limite é dada pela Equação (67).

$$\delta = \frac{d}{\sqrt{Re_d}} \quad (67)$$

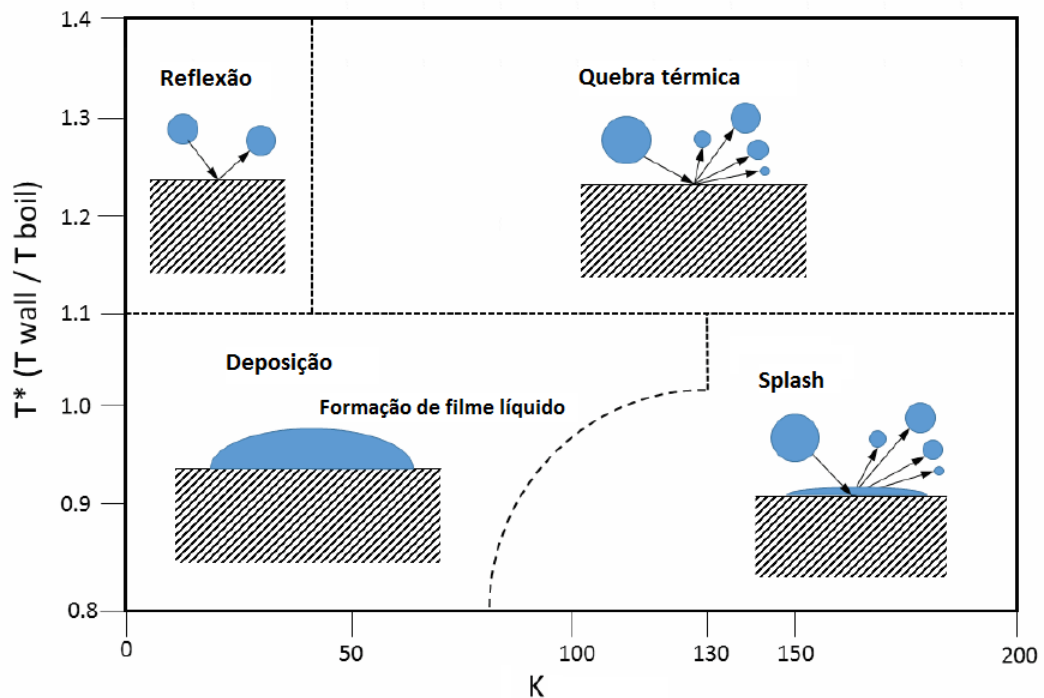
Re_d é o número de Reynolds da gota. O valor de E_{crit}^2 sugerido por O'Rourke e Amsden é de 3330.

Outro modelo de formação de *splash* é o de Kuhnke (KUHNKE, 2004), no qual leva em consideração a temperatura e a espessura do filme líquido para determinar a extensão do *splash* formado. Neste modelo é calculado um valor de K para as parcelas líquidas, como mostrado na Equação (68) e esse valor é comparado com um valor de K crítico para determinar qual processo a gota irá sofrer: quebra térmica, deposição de filme, reflexão de gota ou *splash*, como pode ser visto no desenho esquemático da Figura 2.31. O valor de K crítico vai depender se a parede está seca ou molhada e da espessura de filme na parede molhada.

$$K = We^{5/8} La^{1/8} \quad (68)$$

no qual We é o número de Webber da gota e La é o número de Laplace.

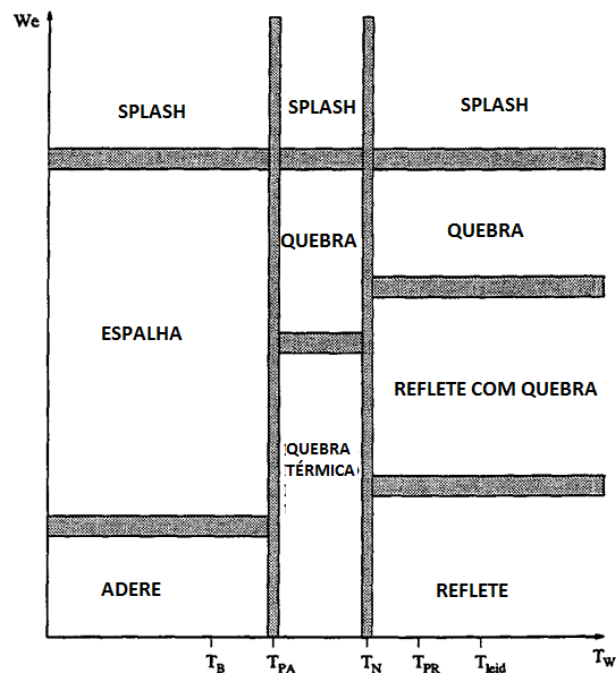
Figura 2.31 – Modelo esquemático representando os possíveis processos no modelo de Kuhnke, com base na temperatura adimensional T^* (Relação entre a temperatura da parede e a temperatura de ebulição do líquido) e no valor de K.



Fonte: adaptado de RICHARDS, 2017

Outro modelo de formação de filme líquido é o modelo de Bai e Gosman (BAI e GOSMAN, 1995), que de forma análoga ao modelo de Kuhnke determina qual evento ocorrerá após a interação com a parede, mas com base no número de Webber da gota e na temperatura adimensional da parede (temperatura da parede pela temperatura de ebulição do líquido), como mostrado na Figura 2.32. A relação de massa da parcela que incide na parede pela massa das parcelas que são geradas no *splash* é diferenciada para parede seca e molhada.

Figura 2.32 – Diferentes processos sofridos por uma gota no modelo de Bai e Gosman de acordo com a temperatura adimensional da parede e número de Webber da gota.



Fonte: adaptado de BAI e GOSMAN, 1995

A modelagem da remoção de filme líquido segue o modelo de quebra de LISA, o qual é detalhado por BAUMGARTEM, 2006. Além disso, o descolamento do filme líquido da parede segue também o critério de O'ROURKE E AMSDEN, 2000.

2.8.2.6 – Colisão de gotas

O modelo de colisão utilizado foi o NTC (SCHMIDT e RUTLAND, 2000), que assume que múltiplas colisões podem ocorrer entre as parcelas segundo uma distribuição de Poisson. Primeiramente, o método organiza as parcelas em grupos que estão na mesma célula da fase contínua. Em seguida, uma subamostra estocástica de todos os pares possíveis de combinação das gotas é escolhida. A amostragem é feita de forma a permitir múltiplas colisões do mesmo

par de gotas. Se existem N gotas em uma célula com uma área de colisão dada por $\sigma_{i,j} = \pi(r_i + r_j)^2$ (sendo r o raio de cada gota) e volume de líquido na células das duas parcelas, Vol , o número esperado de colisões na célula em um intervalo de tempo Δt é dado assumindo a probabilidade de todas possíveis colisões é dada pela Equação (69).

$$M_{coll} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{V_{i,j} \sigma_{i,j} \Delta t}{Vol} \quad (69)$$

Ao agrupar as gotas individuais que possuem propriedades idênticas em parcelas e retirar um fator constante do somatório, a Equação (69) se torna a Equação (70), com q sendo o número de gotas numa célula e N_p o número de parcelas.

$$M_{coll} = \frac{(qV\sigma)_{max} \Delta t}{2Vol} \sum_{i=1}^{N_p} q_i \sum_{j=1}^{N_p} \frac{q_i V_{i,j} \sigma_{i,j}}{(qV\sigma)_{max}} \quad (70)$$

Adicionando uma amostra representativa que pode ser escolhida aleatoriamente do grupo de parcelas na célula, a Equação (71) é a equação final do modelo.

$$M_{coll} = \sum_{i=1}^{N_p \sqrt{\frac{(qV\sigma)_{max} \Delta t}{2Vol}}} q_i \sum_{j=1}^{N_p \sqrt{\frac{(qV\sigma)_{max} \Delta t}{2Vol}}} \frac{q_i V_{i,j} \sigma_{i,j}}{(qV\sigma)_{max}} \quad (71)$$

Após uma parcela ser selecionada, um desvio uniforme de 0 a 1 é usado para determinar se o par de gotas candidato realmente colide. A colisão acontece entre as parcelas i e j se o desvio $desv$ satisfazer a Equação (72):

$$desv < \frac{q_g V_{i,j} \sigma_{i,j}}{(qV\sigma)_{max}} \quad (72)$$

em que q_g é o maior número de gotas entre q_i e q_j . Se a colisão acontecer, dois fenômenos podem acontecer com as gotas: coalescência (as duas gotas se fundem em uma gota maior) ou colisão em que apenas a velocidade é alterada. No caso em que a velocidade é alterada, é assumido que parte da energia cinética da gota é dissipada devido a efeitos viscosos e geração

de momentum angular. As novas velocidades das gotas após a colisão são dadas pelas Equações (73) e (74), com índice 1 para uma gota e 2 para a outra.

$$v_{i,1} = \frac{m_1 v_{i,1} + m_2 v_{i,2} + m_2 (v_{i,1} - v_{i,2})}{m_1 + m_2} \sqrt{1 - f_E} \quad (73)$$

$$v_{i,2} = \frac{m_1 v_{i,1} + m_2 v_{i,2} + m_1 (v_{i,2} - v_{i,1})}{m_1 + m_2} \sqrt{1 - f_E} \quad (74)$$

f_E é a fração de energia dissipada na colisão, calculada pela Equação (75).

$$1 - f_E = \frac{(b - b_{crit})^2}{(r_1 + r_2 - b_{crit})^2} \quad (75)$$

b é o parâmetro de impacto de colisão, dado por $b = (r_1 + r_2)\sqrt{Y}$, Y é um número aleatório entre 0 e 1 e b_{crit} é definido pela Equação (76).

$$b_{crit} = (r_1 + r_2) \min\left(1, 0; \frac{2,4f}{We_{coll}}\right) \quad (76)$$

sendo We_{coll} o número de Webber de colisão, calculado pela Equação (77) e f pela (78).

$$We_{coll} = \frac{\rho_l V_{12}^2 r_2}{\sigma} \quad (77)$$

$$f = \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^3 - 2,4 \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^3 + 2,7 \left(\frac{r_1}{r_2}\right) \quad (78)$$

Se $b < b_{crit}$ o fenômeno ocorrido é coalescência, pelo contrário o outro tipo de colisão acontece. No evento de coalescência, as propriedades da gota que se forma são calculadas utilizando os princípios básicos de conservação.

2.8.3 – Modelagem da combustão

O solver de cinética química detalhada do CONVERGE é o SAGE (SENECAL, 2003) que utiliza o solver CVODES (SUNDIALS, 2015) para resolução de sistemas de equações diferenciais ordinárias. Segundo Turns (TURNS, 2012), um processo de combustão de um

mol de combustível com “a” mols de um oxidante pode ser descrito por uma única reação, chamada de reação global, na qual “b” mols de produtos de combustão são gerados. Esse processo, porém, não ocorre em uma única etapa, mas através de várias reações em sequência, que são chamadas de reações elementares, produzindo várias espécies intermediárias. O conjunto de equações elementares necessário para descrever uma reação global é chamado de mecanismo de cinética química. Um mecanismo cinético químico pode ser escrito utilizando a notação compacta, conforme mostrado na Equação (79).

$$\sum_{m=1}^M v'_{m,r} X_m \Leftrightarrow \sum_{m=1}^M v''_{m,r} X_m \quad \text{para } r = 1, 2, \dots, R \quad (79)$$

$v'_{m,r}$ e $v''_{m,r}$ são os coeficientes estequiométricos dos reagentes e dos produtos respectivamente para a espécie m e a reação r . R é o número total de reações, M é o número total de espécies e X_m é a representação do símbolo químico para a espécie m . A taxa de produção líquida de cada espécie química ($\dot{\omega}_m$) em um mecanismo é dada pelo somatório da taxa de produção da espécie em cada reação elementar na qual ela é formada menos a taxa de formação dela em cada reação na qual ela é consumida, conforme mostrado na Equação (80):

$$\dot{\omega}_m = \sum_{r=1}^R v_{m,r} q_r \quad \text{para } m = 1, 2, \dots, M \quad (80)$$

Sendo M o número total de espécies e com $v_{m,r}$ dado pela Equação (81) e q_r é a variável de taxa de progresso, dada pela Equação (82).

$$v_{m,r} = (v''_{m,r} - v'_{m,r}) \quad (81)$$

$$q_r = k_{fr} \prod_{m=1}^M [X_m]^{v'_{m,r}} - k_{rr} \prod_{m=1}^M [X_m]^{v''_{m,r}} \quad (82)$$

$[X_m]$ é a concentração molar da espécie química m e k_{fr} e k_{rr} são os coeficientes de taxa das reações elementares direta e reversa, respectivamente, da reação r . Se a faixa de temperatura de interesse não é muito extensa, o coeficiente de taxa de reação bimolecular pode ser expresso pela forma empírica de Arrhenius (Equação (83)).

$$k_{fr} = A_r T^{b_r} e^{(-E_r/R_u T)} \quad (83)$$

A_r é o fator pre-exponencial, b_r é o expoente de temperatura, E_r é a energia de ativação e R_u é a constante do gás universal. O coeficiente da reação reversa pode tanto ser especificado segundo a equação de Arrhenius, quanto ser calculado com base no coeficiente de equilíbrio k_{cr} (Equação (84)).

$$k_{rr} = \frac{k_{fr}}{k_{cr}} \quad (84)$$

O coeficiente de equilíbrio por sua vez é dado por pelas propriedades termodinâmicas (Equação (85)).

$$k_{cr} = k_{pr} \left(\frac{P_{atm}}{RT} \right)^{\sum_{m=1}^M \nu_{mr}} \quad (85)$$

Sendo P_{atm} a pressão atmosférica, R a constante do gás, T a temperatura e k_{pr} a constante de equilíbrio, que por sua vez é calculada pela Equação (86):

$$k_{pr} = \exp \left(\frac{\Delta S_r^0}{R} - \frac{\Delta H_r^0}{RT} \right) \quad (86)$$

no qual S é a entropia e H é a entalpia e Δ denota a mudança que ocorre na transformação de reagentes para produtos na r – ésima reação, mostrados respectivamente pelas Equações (87) e (88).

$$\frac{\Delta S_r^0}{R} = \sum_{m=1}^M \nu_{mr} \frac{S_m^0}{R} \quad (87)$$

$$\frac{\Delta H_r^0}{RT} = \sum_{m=1}^M \nu_{mr} \frac{H_m^0}{RT} \quad (88)$$

A entalpia e a entropia molar de estado padrão da espécie m são calculadas utilizando polinômios de ajustes, nos quais a_{im} são constantes de cada polinômio, mostrados nas Equações (89) e (90), respectivamente.

$$\frac{H_m^0}{RT_m} = a_{1m} + \frac{a_{2m}}{2}T_m + \frac{a_{3m}}{3}T_m^2 + \frac{a_{4m}}{4}T_m^3 + \frac{a_{5m}}{5}T_m^4 + \frac{a_{6m}}{T_m} \quad (89)$$

$$\frac{S_m^0}{R} = a_{1m} \ln(T_m) + a_{2m}T_m + \frac{a_{3m}}{2}T_m^2 + \frac{a_{4m}}{3}T_m^3 + \frac{a_{5m}}{4}T_m^4 + a_{7m} \quad (90)$$

Após calculada a taxa de produção líquida de cada espécie ($\dot{\omega}_m$) com base no mecanismo de cinética química, ela é introduzida nas equações de conservação de massa e de energia (Equações (91) e (92).)

$$\frac{d[X_m]}{dt} = \dot{\omega}_m \quad (91)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\frac{\dot{Q}}{V} - \sum_m(\bar{h}_m \dot{\omega}_m)}{\sum_m([X_m] \bar{c}_{p,m})} \quad (92)$$

Da primeira lei da termodinâmica e utilizando a definição de entropia, tem-se a Equação (93):

$$\frac{dh}{dt} = \frac{1}{\rho} \frac{dp}{dt} - \frac{dQ}{dt} \quad (93)$$

Sendo Q a taxa de transferência de calor específica, ρ a densidade, p a pressão e h a entalpia específica da mistura, que para um gás ideal é dada pela Equação (94).

$$h = \sum_{m=1}^M h_m Y_m \quad (94)$$

A entalpia sensível H_m^s é calculada com base na entalpia padrão H_m^0 , conforme mostrado na Equação (95).

$$H_m^s(T_m) = \left(a_{1m} + \frac{a_{2m}}{2}T_m + \frac{a_{3m}}{3}T_m^2 + \frac{a_{4m}}{4}T_m^3 + \frac{a_{5m}}{5}T_m^4 + \frac{a_{6m}}{T_m} \right) RT_m - H_m^0(298,15) \quad (95)$$

2.8.4 – Condições de Contorno

Cada fronteira do domínio deve ser associada a uma condição de contorno para a resolução das equações diferenciais parciais. A condição de contorno na qual uma variável é prescrita é

chamada de Dirichlet e, a condição na qual o valor da primeira derivada é especificado é chamada de Neumann, elas são expressas pelas Equações (96) e (97), respectivamente:

$$\phi = f(\text{Dirichlet}) \quad (96)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = f(\text{Neumann}) \quad (97)$$

Em que ϕ é uma variável resolvida, como por exemplo, pressão, energia, etc. e f é o valor especificado para a fronteira. A condição de contorno de pressão se for do tipo de pressão prescrita, pode ser dada em termos da pressão total (P_{total}), e a pressão estática pode ser calculada para escoamentos compressíveis pela Equação (98):

$$P_{total} = P_{estática} \left(1,0 + \frac{\gamma - 1}{2} \frac{u_i^2}{\gamma RT} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (98)$$

Em que γ é a razão entre os calores específicos, $P_{estática}$ é a pressão estática, u_i é a velocidade e R é a constante do gás. Para condição de contorno de turbulência, pode ser utilizada a condição de Dirichlet e o valor da intensidade turbulenta na fronteira ser fornecida (I^2), dessa forma, o valor da energia cinética turbulenta (k) pode ser calculado pela Equação (99):

$$k = \frac{3}{2} u_i^2 I^2 \quad (99)$$

De uma maneira análoga, a condição de contorno para dissipação de energia cinética turbulenta (ε), pode ser calculada com base na energia cinética turbulenta (k), no valor da constante C_μ do modelo de turbulência e num comprimento de escala fornecido (le), por meio da Equação (100):

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} k^{3/2}}{le} \quad (100)$$

A condição de contorno de parede na abordagem de alto número de Reynolds utiliza a lei de parede para perfil de velocidade e para transferência de calor com a parede. A lei de parede de

velocidade é um ajuste com perfil logarítmico para a camada limite turbulenta. Próximo à parede existe dominância dos efeitos viscosos sobre os efeitos inerciais no escoamento de um fluido. Utilizando análise dimensional, a velocidade adimensional do escoamento (u^*) na camada limite próxima à parede (sub-camada viscosa linear) pode ser expressa pela Eq. (101). Fora da região da sub-camada viscosa existe uma região na qual tanto os efeitos viscosos quanto os inerciais são de importância no escoamento e é chamada de camada logarítmica, mostrada na Equação (102):

$$u^* = y^+ \quad y^+ \leq 11,2 \quad (101)$$

$$u^* = \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^+) \quad y^+ > 11,2 \quad (102)$$

Nas equações, y^+ é a distância adimensional da parede (mostrada na Equação (103)), u^* é a velocidade adimensional (mostrada na Equação (104)) κ é a constante de Von Karman (0,4187), E é uma constante cujo valor é 9,8, u_τ é chamada de velocidade de fricção, que, ao se utilizar o modelo de turbulência k- ϵ , pode ser pela Equação (105):

$$y^+ = \frac{y\rho u_\tau}{\mu} \quad (103)$$

$$u^* = \frac{U_i \rho u_\tau}{\sigma_{ij}} \quad (104)$$

$$u_\tau = C_\mu^{1/4} k^{1/2} \quad (105)$$

No qual U_i é a velocidade tangencial relativa, C_μ é a constante do modelo de turbulência e k é a energia cinética turbulenta. Por fim, obtém-se a Equação (106) para o tensor de tensões da lei de parede:

$$\sigma_{ij} = \frac{U_i \kappa \rho u_\tau}{\ln(Ey^+)} \quad (106)$$

Além disso, a fronteira pode ser estática ou ter algum tipo de movimento, que, no caso de simulações de motores de combustão interna, existe o movimento de translação das válvulas e do pistão. Para contemplar o movimento das válvulas, deve ser conhecido o perfil de abertura e fechamento das válvulas em função do tempo, que na maioria das vezes é dado em função

do ângulo do eixo de manivelas (virabrequim), θ . A posição do pistão na direção axial do cilindro (z_{piston}) também pode ser calculada em função do ângulo do virabrequim e de dados geométricos do motor, como mostrado na Equação (107):

$$z_{piston} = 2a - l \left[1 - \cos \left(\sin^{-1} \left(\frac{a \sin \theta + pin_{off}}{l} \right) \right) \right] - a(1 - \cos \theta) \quad (107)$$

no qual a representa metade do curso do pistão, l é o comprimento da biela e pin_{off} é a descentralização do pino do pistão (RICHARDS, 2017).

Para a condição de contorno de temperatura nas paredes foi utilizada a condição de temperatura prescrita (Dirichlet) em todas as fronteiras de parede e, analogamente à lei de parede para perfil de velocidades, a lei de parede para transferência de calor utilizada foi a de O'Rourke e Amsden (AMSDEN *et al.*, 1997), na qual o fluxo de calor é dado pela Equação (108).

$$k \frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{\mu_m c_p F(T_f T_\omega)}{Pr_m y} \quad (108)$$

no qual F é função da região da camada limite, como mostrado na Equação (109):

$$F = 1 \quad y^+ < 11,05$$

$$F = \frac{\left(\frac{y^+ Pr_m}{Pr_t} \right)}{\frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + B + 11,05 \left(\frac{Pr_m}{Pr_t} - 1 \right)} \quad y^+ \leq 11,05 \quad (109)$$

Sendo k a condutividade molecular, κ a constante de Von karman, B é uma constante do modelo, Pr_m é o número de Prandtl molecular, Pr_t é número de Prandtl turbulento, T_f é a temperatura do fluido e T_ω a temperatura da parede.

Para condição de contorno de dissipação de energia cinética turbulenta na parede (ε), ela pode ser calculada com base nas constantes e variáveis do modelo de turbulência, como mostrado na Equação (110).

$$\varepsilon = \frac{C_{\mu}^{0,75} k^{1,5}}{\kappa y} \quad (110)$$

Com C_{μ} sendo uma constante do modelo de turbulência, k é a energia cinética turbulenta, y é a distância da parede ao centro de célula e κ é a constante de Von Karman.

2.9 – Trabalhos que utilizaram cinética química em motores de combustão interna

A seguir são descritos alguns trabalhos que utilizaram mecanismos de cinética química para simular o fenômeno da detonação em motores de combustão interna.

WANG *et al.* (2012) modelaram ciclos de detonação em um motor monocilindro ótico de ignição por centelha operando a 1000 rpm, plena carga e razão ar/combustível estequiométrica com o código KIVA. O modelo de combustão foi o G-Equation (para região de pós-oxidação) acoplado com modelo de cinética química reduzido de 47 espécies e 132 reações para queima de PRF (*Primary Reference Fuel* - que é formado por isooctano e n-heptano) na região a frente da frente de chama. Os autores propuseram um novo modelo de troca de calor do gás com as paredes do motor para contabilizar a elevada perda térmica durante o fenômeno da detonação e o modelo de turbulência foi o RNG k- ε . Nas suas análises, foi utilizado o radical HCO para identificar espacialmente o início de um processo de autoignição da mistura ar combustível e o radical OH foi utilizado para representar a região de pós-oxidação da combustão. Os autores encontraram diferenças no início do aparecimento das oscilações de pressão (considerado início da detonação) entre a simulação e o experimento. As diferenças foram relacionadas à sensibilidade da autoignição do combustível devido às incertezas nas condições de contorno e das variabilidades cíclicas no motor com gasolina.

PAN *et al.* (2017) investigaram quantitativamente o fenômeno da detonação (*knock*) e super detonação (*super-knock*) utilizando Large Eddy Simulation (LES) em conjunto com cinética química detalhada (a malha computacional foi da ordem de 0,1 a 0,2 mm no entorno da vela de ignição e 0,5 a 1,0 mm no restante do domínio). O mecanismo cinético químico utilizado foi o desenvolvido por LIU (2013). Na primeira etapa do trabalho, ciclos clássicos de detonação induzida pelo aumento do avanço de ignição foram reproduzidos através das simulações utilizando o isooctano como combustível. Em seguida, foram utilizadas diferentes proporções do PRF (com o intuito de reproduzir uma contaminação da mistura por óleo

lubrificante) pra um mesmo avanço de ignição e ciclos de super-detonação foram observados na medida em que o número de octanos da mistura foi reduzido. Os autores observaram que a intensidade da super-detonação nem sempre é diretamente relacionada com o número de octanos do combustível e que as ondas de combustão no regime de detonação podem ser induzidas tanto pelo aparecimento de vários pontos de autoignição da mistura, quanto pelo surgimento de apenas um ponto de autoignição, mas que o ultimo produz detonações mais severas.

PARK E FURUKAWA (2015) realizaram simulações da combustão em um motor de ignição por centelha com três diferentes mecanismos de cinética química reduzidos visando a detecção de detonação. Um cilindro do motor foi instrumentado com o sensor de luminosidade VisioKnock da empresa AVL e traços de pressão no cilindro foram registrados em condições que o motor apresentou características de detonação. A rotação do motor nos testes foi 2250 rpm, duas condições de carga de 14 e 16 bar de pressão média efetiva foram testadas, a injeção de combustível foi dividida em duas etapas, o fator lambda foi mantido em 1,1 e o combustível utilizado foi gasolina (PRF com RON 95). Os mecanismos de cinética química reduzidos testados foram: o mecanismo de JIA *et al.* (2006) (38 espécies e 59 reações) para oxidação de isooctano, LIU *et al.* (2013) (48 espécies e 152 espécies) e Tsurushima (2009) (38 espécies e 47 reações), ambos para oxidação de isooctano e n-heptano (PRF). As condições de contorno da simulação foram provenientes de uma simulação 1D com o programa GT-Power e para modelar a turbulência foi utilizado o modelo RNG $k-\epsilon$ no programa comercial CONVERGE. Um refinamento adaptativo de malha foi utilizado, no qual o menor tamanho do elemento de malha foi de 0,5 mm baseado no gradiente de temperatura durante a combustão. Além disso, foi feita uma análise de sensibilidade da intensidade do pico de pressão filtrado para indicar detonação ao refino de passo de tempo. Para isso foi mantido o número de Courant-Fredrichs-Lewy baseado no número de Mach sempre abaixo de um valor determinado. Quando o valor máximo de 3,5 foi escolhido, segundo os critérios definidos pelos autores, a simulação não indicou detonação. Porém, quando o valor foi de 1,75, a máxima amplitude das oscilações da pressão superou o critério definido como detonação. O resultado da simulação conseguiu identificar corretamente o instante de início da detonação e também a região em que a detonação predominantemente surgia no cilindro (próxima das válvulas de exaustão que estavam mais quentes) considerando os dados experimentais obtidos com VisioKnock.

YASUEDA, TOZZI e SOTIROPOULOU (2013) utilizaram o programa comercial CONVERGE para simular ciclos de detonação devido à contaminação com óleo lubrificante em um motor de ignição interna trabalhando com gás natural. Nas simulações, a autoignição do óleo lubrificante foi modelada utilizando um mecanismo de cinética química produzido pelos autores. O óleo lubrificante foi introduzido no domínio em forma de gotas durante o tempo de admissão do motor e os resultados obtidos pelas simulações confirmaram o que foi observado experimentalmente: dependendo da temperatura do gás no final da compressão e da razão de equivalência algumas gotas de óleo lubrificante autoignitavam, mas isso não era suficiente para causar a autoignição do restante da mistura ar-gás natural no cilindro. Na medida em que a temperatura do gás no final da compressão foi aumentada, a autoignição do óleo lubrificante passou a ser suficiente para ocasionar uma combustão espontânea da mistura. Estudo similar foi feito por JAASIM *et al.* (2017), porém utilizando isoctano como combustível em um motor de injeção direta e como modelo de combustão G-Equation na região de pós oxidação e mecanismo de cinética química de LIU, 2013 para capturar autoignição na região a frente da frente de chama. Os autores identificaram que quando um ponto quente foi introduzido por volta de 30° antes do PMS do motor, ciclos com superdetonação foram observados.

YANG *et al.* (2017) modelaram a combustão turbulenta pré-misturadas utilizando mecanismo de cinética química detalhada em conjunto com o modelo de turbulência RNG $k-\epsilon$. Os autores utilizaram o mecanismo de LIU (2012) para queima de PRF e realizaram melhorias no mecanismo para resolver problemas de rápidas autoignições não realistas na mistura além de validarem mais condições de pressão e temperatura para velocidade de chama laminar do que foi feito no mecanismo original. Os autores comentam que para simulações com modelos RANS, as menores escalas modeladas estão na faixa de 0,1 a 1,0 mm. Em seu trabalho, foram utilizadas diversas condições experimentais de diferentes tipos de motores (variando velocidade de rotação, pressão e temperatura médias do gás, razão de equivalência e concentração de EGR) e, com base no programa comercial CHEMKIN-PRO e de dados experimentais do Lawrence Livermore National Laboratory, os atrasos de ignição e velocidade de chama laminar do mecanismo de LIU foram ajustados para valores mais realistas nas condições práticas de operação dos motores de combustão interna. Foram testadas cinco condições de operação do motor (variando desde condição de marcha lenta, partida a frio, até plena carga e alta rotação) e os resultados no geral mostraram uma correlação muito boa de curva de pressão no cilindro e intervalos de queima, mas em algumas

condições os resultados de NO_x e de hidrocarbonetos não queimados se afastaram dos medidos experimentalmente.

ROBERT *et al.* (2014 e 2015) simularam 15 ciclos de um motor com Large Eddy Simulation para modelagem da turbulência e analisaram dois regimes de autoignição da mistura ar-combustível (isooctano): detonação convencional e super-detonação. O modelo de combustão foi o ECFM-LES e as simulações reproduziram muito bem o valor de IMEP médio entre os ciclos e a covariância do IMEP, assim como a máxima intensidade da detonação na medida em que o avanço de ignição foi variado. Em relação à distribuição espacial dos pontos de autoignição no cilindro (monitorada com base na variável de progresso de reação da autoignição), foi visto que ela surgiu de forma aleatória no cilindro durante os ciclos, mas mais próximo da região das válvulas de exaustão (que possuíam uma temperatura de 150K superior às válvulas de admissão e do restante da câmara de combustão). Além disso, foi observado que as maiores intensidades de detonação ocorreram quando a autoignição consumiu maiores quantidades de mistura ar-combustível e os autores fizeram um estudo da transição do regime de combustão de deflagração para detonação relacionando o início da autoignição e a intensidade da detonação.

PAL *et al.* (2017) simularam utilizando o programa comercial CONVERGE um motor mono cilindro CFR (*cooperative fuel research engine*) utilizando também o modelo G-Equation para modelar a frente de chama e a região de pós oxidação do combustível e um modelo de cinética química reduzido pelos autores com 121 espécies para oxidação de combustível primário de referência (PRF). Diferentes misturas do PRF foram simuladas em condições específicas dos testes de RON e MON com diferentes relações volumétricas de compressão para determinar a relação crítica de compressão do motor e traçar a região de detonação e não detonação do motor. O modelo de turbulência utilizado no trabalho foi o RNG $k-\epsilon$ e o número de Courant-Fredrichs-Lewy baseado no número de Mach máximo nas simulações foi de 1,0. O mecanismo de cinética química utilizado (WU *et al.* 2017) foi reduzido com base no mecanismo de MEHL *et al.* (2011). Como critério para determinar se houve detonação o indicador MAPO limite utilizado foi de 0,5 bar de pressão e o filtro de frequência para obter as flutuações de pressão foi de 4 a 20 KHz. Os autores concluem que o modelo conseguiu prever bem a razão de compressão crítica para surgimento de detonação para diferentes misturas de PRF.

BATTISTONI *et al.* (2017) utilizaram o programa CONVERGE para simular um cilindro de um motor 4 cilindro de 1,4 litros com relação volumétrica de compressão de 10:1 e BMEP máximo de 20 bar. O enfoque da pesquisa dos autores foi analisar, com base em simulações 3D, a injeção de água nos coletores de admissão para suprimir o fenômeno de detonação. O trabalho foi dividido em duas etapas, na primeira, duas abordagens para modelar a combustão foram testadas: G-Equation mais mecanismo de cinética química reduzido e apenas o mecanismo de cinética química reduzido. O tamanho da malha base utilizada foi de 4,8 mm atingindo valores mínimos de 0,15 mm durante o tempo de centelha com um refinamento adaptativo de velocidade e temperatura gerando células com o tamanho de 0,6 mm. O modelo de turbulência foi o RNG $k-\varepsilon$ e o CFL máximo de Mach foi de 3,0. O combustível utilizado foi o TPRF (Toluene Primary Reference Fuel – que é o PRF adicionado de tolueno) e o modelo de cinética química foi um semi-reduzido proposto por ANDRAE *et al.* (2008). Os autores concluíram que utilizar o modelo combinado de G-Equation com mecanismo de cinética química é a abordagem mais indicada para simular o fenômeno da detonação. Por fim, com base nas simulações os autores observaram que posicionar o injetor de água bem próximo das válvulas de admissão do motor mostrou melhores resultados na supressão de detonação do que quando o injetor foi posicionado logo no início do coletor devido à formação de filme líquido.

A seguir, na Tabela 2.1, são resumidos alguns trabalhos que utilizaram mecanismos cinético-químicos em conjunto com simulações 3D de motores de combustão interna. Enfoque é dado no combustível utilizado, assim como no mecanismo para sua oxidação, no modelo de turbulência e no código utilizado. É possível notar que a maioria dos trabalhos listados utiliza o PRF (do inglês, *Primary Reference Fuel*) que é um combustível simplificado de referência para a gasolina composto de isooctano e n-heptano. Outros combustíveis de referência são o TPRF, que é composto de isooctano, n-heptano e tolueno e o ERF (*ethanol reference fuel*), composto de etanol, tolueno, isooctano e n-heptano. Na Revisão Bibliográfica não foi encontrado nenhum trabalho utilizando um mecanismo único para validar simulação de combustão em motores operando com misturas de gasolina e etanol como combustível, o que reforça a importância de trabalhos que tenham o objetivo de validar mecanismos para essas misturas, que é tão presente na matriz energética brasileira.

Tabela 2.1 – Trabalhos envolvendo simulação 3D de motores de combustão interna com mecanismos cinético-químicos, com indicação do modelo de turbulência, combustível, referência do mecanismo, se foi utilizado para simular detonação ou não e o programa computacional utilizado.

REFERÊNCIA	TURBULÊNCIA	COMBUSTÍVEL	MECANISMO	KNOCK	CÓDIGO
PAN, 2017	LES	Isooctano, PRF	LIU 2013	SIM	Converge
PARK, 2015	RNG- k- ϵ	PRF	LIU, 2013, JIA, 2006, TSURUSHIMA, 2009	SIM	Converge
YANG, 2017	k- ϵ	PRF	LIU, 2012	-	Kiva 3
ROBERT, 2015	LES	Isooctano	ECFM, TKI: JERZEMBECK, 2009	SIM	AVBP
MUBARAK, 2017	RNG- k- ϵ	Isooctano	G-EQUATION: LIU, 2013	SIM	Converge
GLIVER, 2013	RNG- k- ϵ	PRF	JIA, 2006	-	Converge
HINDI, 2009	RNG- k- ϵ	Etanol e Isooctano	ROHL, 2009 (Etanol); JIA, 2006 (Isooctano)	-	Converge
PAL, 2017	RNG- k- ϵ	PRF	G-EQUATION, WU 2017	SIM	Converge
BATTISTONI, 2017	k- ϵ	TPRF	G-EQUATION E ANDRAE 2008	SIM	Converge
MITTAL, 2017	RNG- k- ϵ	PRF	JIA, 2006 MODIFICADO	-	Converge
BATTISTONI, 2015	RNG- k- ϵ	Etanol e Isooctano	LIU, 2012 (Isooctano); RANZI, 2012 (Etanol)	-	Converge

Fonte: autor

3 - METODOLOGIA

As simulações apresentadas neste trabalho são baseadas em duas categorias de experimento realizado. Na primeira categoria (será referida como “Categoria 1”), foram realizados testes experimentais (pela equipe de experimentações do CTM-UFMG) no motor monocilindro para diversas cargas e rotações e variando a proporção de etanol e gasolina no combustível (de E0 até E100), com um modelo de pistão próprio para injeção indireta de combustível (embora todos os testes tenham sido feitos com injeção direta) e relação volumétrica de compressão de 11,5:1. Porém, devido a uma falha no sensor rápido de pressão, não foi medido dado de pressão dos gases no coletor de exaustão do motor – que é utilizado como condição de contorno nas simulações 3D. Na segunda categoria de testes experimentais (“Categoria 2”), foi feita a medição de pressão em função do ângulo do eixo do motor na fronteira de exaustão, mas, desta vez, utilizando um pistão com geometria própria para injeção direta de combustível e com relação volumétrica de compressão de 12:1. Dessa forma, cada categoria de dados experimentais foi utilizada com diferentes finalidades, como é descrito em seguida.

Categoria 1 – sem dado de pressão na exaustão, pistão próprio para PFI, relação volumétrica de compressão de 11,5:1:

- validação de uma simulação 3D utilizando as constantes ajustadas do modelo de quebra de gotas de Kelvin-Helmholtz e Rayleigh-Taylor para um caso com combustível E100 e um mecanismo cinético químico reduzido de referência da literatura para etanol (ROHL, 2009);
- verificação da influência do modelo de interação de gota com as paredes;
- simulação de um caso extrapolado com detonação utilizando o mecanismo escolhido e validado nesse trabalho.

Categoria 2 – com dados de pressão na exaustão, pistão próprio para DI, relação volumétrica de compressão de 12:1 – Utilizada para escolha do mecanismo cinético-químico apropriado para caracterização de detonação (uma vez que, para a correta simulação e validação de ciclos com a presença de detonação, deve-se utilizar o traço de pressão mais fiel ao real possível), dessa forma foram feitas simulações de:

- pontos com avanço de ignição para máximo torque de eixo (condições de referência dos casos sem detonação), com o modelo de quebra de gota e de interação das gotas com as paredes já definidos;
- pontos com avanço de ignição condicionados para limite de detonação $+2 \text{ CA}^\circ$ (condição de referência para avaliar a capacidade de predição e caracterização de detonação dos mecanismos), com o modelo de quebra de gota e de interação das gotas com as paredes já definidos.

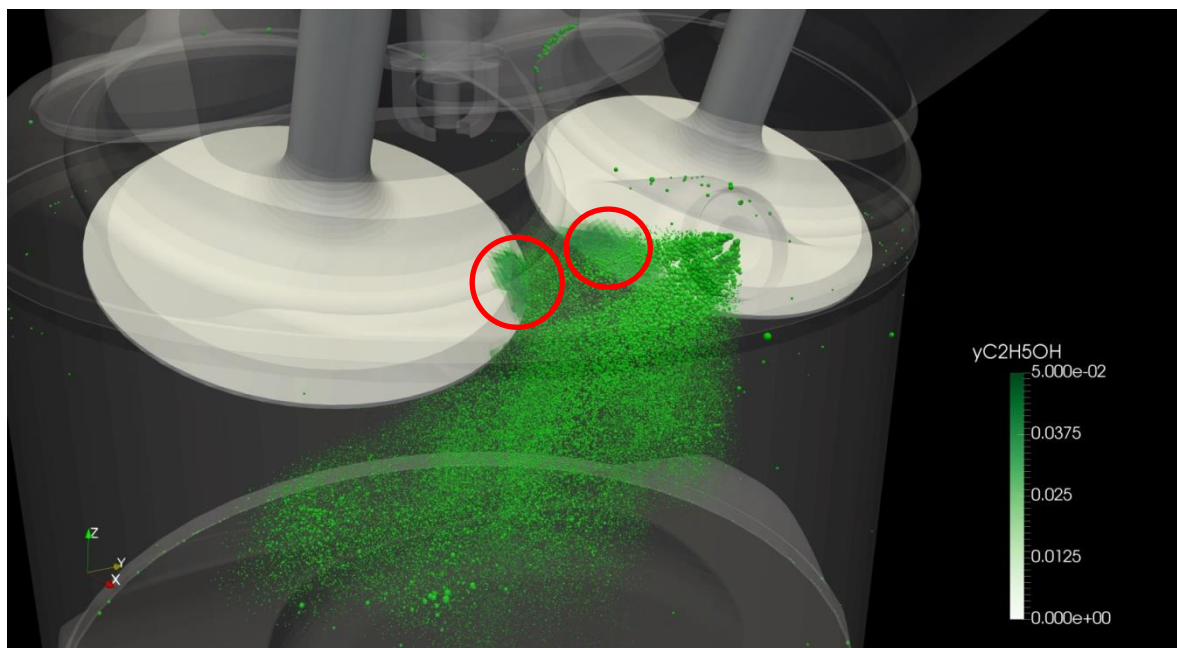
3.1 – Organização da metodologia

A primeira etapa da metodologia tem o objetivo de aumentar a confiabilidade dos resultados relacionados aos modelos de spray de combustível, dessa forma, foi feita a calibração das constantes do modelo de quebra secundária de gotas através das simulações de spray em bancada utilizando etanol como combustível. A escolha do etanol está relacionada com o fato de ser um combustível composto por apenas duas espécies químicas, etanol e água. Assim, as propriedades do combustível são mais facilmente obtidas na literatura. A gasolina, por sua vez, é uma mistura de diversos hidrocarbonetos que, segundo Turns (TURNS, 2013) pode chegar a quase 1000 espécies, e, dessa forma, o desafio já começa na escolha das espécies que definirão o combustível. Conseqüentemente, a definição das propriedades representativas do combustível também se faz uma tarefa complexa. Um exemplo de propriedade que impacta diretamente nos resultados das simulações é o coeficiente de difusividade mássica do vapor de combustível, conforme é mostrado no trabalho de Moraes (MORAES, 2018).

Após a calibração das constantes de quebra, esse modelo de spray foi aplicado em uma simulação 3D do motor monocilindro operando com combustível E100 e os resultados validados com dados experimentais. Como as constantes de quebra estão mais relacionadas com a geometria e as características do injetor do que com as propriedades do combustível, a mesma configuração que foi validada para o etanol foi aplicada em um caso com Gasolina. Os mesmos resultados satisfatórios obtidos no caso com E100 não foram alcançados no caso da gasolina durante a fase inicial desse trabalho. A potencial fonte de incerteza no valor da constante de difusividade mássica e a falta de um mecanismo cinético-químico confiável para queima para uma mistura qualquer de etanol e gasolina na literatura trouxe também dúvidas em relação ao modelo de interação do spray com as paredes do motor, uma vez que dois dos sete orifícios de injeção do injetor proporcionam jatos que atingem diretamente a válvula de

admissão enquanto esta ainda está aberta, dependendo do instante de início da injeção, como pode ser visto na Figura 3.1.

Figura 3.1 – Spray de combustível atingindo as válvulas de admissão em casos que a injeção é feita com as válvulas abertas.



Fonte: autor

Como foi visto no capítulo de Revisão Bibliográfica, o modelo de interação das parcelas de combustível com as superfícies sólidas impacta diretamente no resultado dessa interação, ou seja, se acontecerá uma aderência, reflexão, quebra, quebra e reflexão, *splash* da gota ou etc. Assim, três modelos foram testados em um caso com gasolina E27, com velocidade de rotação do eixo do motor de 2000 rpm e 4 bar de BMEP de carga: O' Rourke, Bai-Gosman e Kuhnke. Não foram feitos testes experimentais de spray atingindo superfícies sólidas e formando filme líquido para validação dos modelos, dessa forma os resultados foram analisados de forma qualitativa em comparação com dados experimentais.

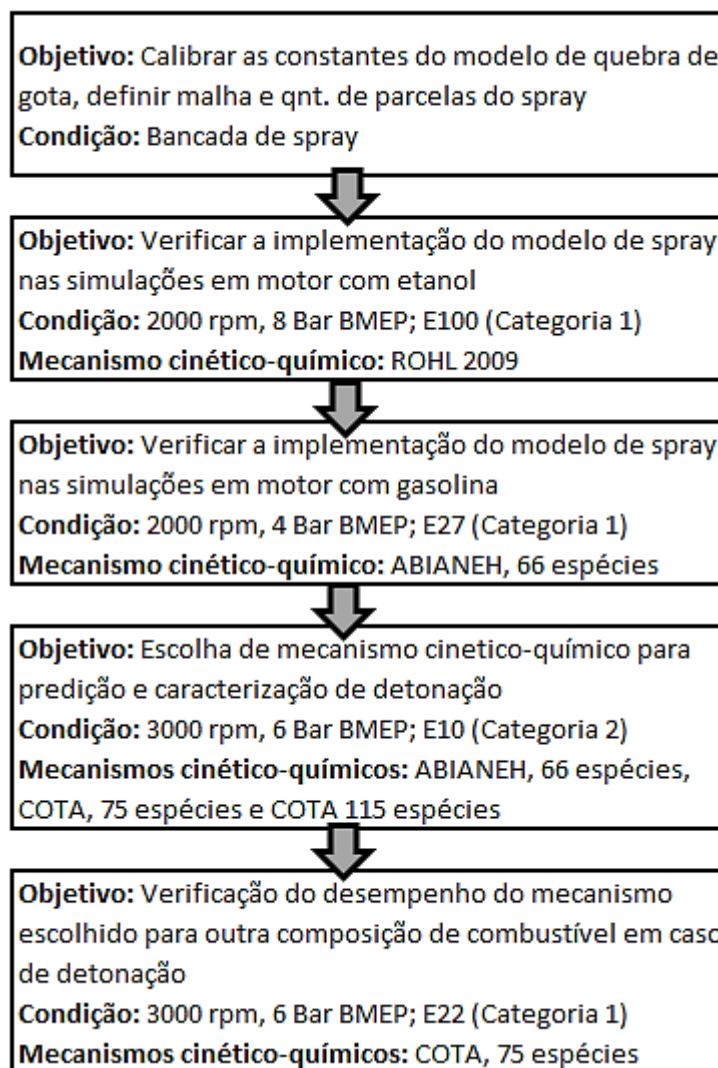
Definido o modelo de filme líquido que apresentou melhores resultados, foram selecionados três mecanismos cinético-químicos para oxidação de mistura etanol/gasolina, validados no trabalho de Vaz (VAZ, 2018) para avaliar a capacidade de predição de denotação dos mesmos. Portanto, foi escolhido um caso da Categoria 2 de experimentos realizados que apresentou tanto a condição de avanço de ignição para atingir máximo torque de eixo do motor (MBT), quanto avanço de ignição que atingisse o limite de detonação (após o ponto de

MBT) e que o intervalo angular entre as duas condições fosse o maior possível. O caso escolhido teve velocidade de rotação do eixo do motor de 3000 rpm, condição de carga de 6 bar de BMEP e combustível E10. A prova experimental que resultou em MBT teve um avanço de ignição de $18,5^\circ$ (APMS – antes do ponto morto superior) e a prova com limite de detonação teve avanço de $22,5^\circ$ (APMS). Para conseguir um intervalo maior de avanço de ignição entre a prova de MBT e de limite de detonação e também proporcionar ciclos com traços de detonação mais evidentes, após o avanço do limite de detonação durante os testes experimentais, foi conferido mais $2,5^\circ$ de avanço de ignição (acarretando em um avanço de ignição de 25° APMS) durante um curto intervalo de tempo de funcionamento do motor (suficiente para armazenar três ciclos do motor nesta condição). Os traços de pressão no cilindro desses ciclos foram então armazenados e utilizados para comparação com os resultados das simulações com o mesmo avanço de ignição, que será chamado de “avanço de ignição forçado” apenas para diferenciar dos demais avanços. O modelo mais satisfatório é aquele que no caso de MBT não apresentar traços de detonação; e no caso de detonação apresentar detonação e cujos valores dos índices para quantificar a detonação mais se aproximam dos obtidos experimentalmente.

Após a escolha do mecanismo cinético químico utilizando um caso em que as três pressões da admissão, exaustão e do cilindro foram medidas experimentalmente (casos da Categoria 2), foi utilizado outro caso que apresentou traços de detonação, mas que não foi medida pressão na fronteira de exaustão (Categoria 1), com o intuito de extrapolar os resultados do caso validado para outra composição de etanol/gasolina. Nessa etapa, foi utilizada uma prova com combustível E22, velocidade de rotação do motor de 3000 rpm e 6 bar de BMEP de carga.

A distribuição dos casos simulados é resumida na Figura 3.2.

Figura 3.2 – Resumo de cada caso simulado com o objetivo principal.



Fonte: autor

3.2 – Validação do modelo de quebra secundária de gota

A primeira etapa da metodologia deste trabalho é a validação do modelo de quebra de gota do spray de combustível. A metodologia completa e detalhada pode ser encontrada em BRAGA, 2017. O modelo de quebra de gotas utilizado foi o de Kelvin-Helmholtz e Rayleigh-Taylor combinados (KH-RT) e as constantes do modelo que foram ajustadas foram B1 do modelo KH, C3 do modelo RT e Cb do modelo combinado KH-RT, conforme mostrado na etapa de Revisão Bibliográfica. O injetor caracterizado foi o multi-orifícios HDEV 5.1 da Bosch, com sete orifícios de 0,17 mm de diâmetro. Cada orifício forma um spray de cone cheio com ângulo externo de 20°. Foram feitas simulações de uma injeção de combustível em uma câmara cilíndrica quiescente e os resultados comparados com medições experimentais

apresentadas no trabalho de GUZZO, 2012. As condições de pressão e temperatura do ar da câmara foram de 1 bar e 300 K, respectivamente. A pressão de injeção foi de 100 bar e a vazão mássica do injetor nessa condição é de 0,01134 kg/s. A duração da injeção foi de 1,5 ms, que representa uma duração de injeção para a condição com o motor a 2400 rpm e com injetor aberto 3% do tempo do ciclo, resultando em 17 mg de combustível E100 injetado. O domínio computacional foi uma câmara cilíndrica de 25 mm de diâmetro e 30 mm de altura e as simulações foram feitas utilizando o programa CONVERGE.

A malha base utilizada foi de 4 mm, com um refinamento fixo em formato cilíndrico encobrendo apenas os orifícios do injetor, com 4 níveis de refinamento (0,25 mm de malha). Foi feito um estudo de sensibilidade da curva de penetração de líquido, diâmetro médio de Sauter (SMD) e quantidade de combustível evaporado ao tamanho de malha e à quantidade de parcelas injetadas. Esse estudo de refino de malha foi baseado no trabalho de SENEAL *et al.*, 2012, o qual apresenta um estudo de convergência de malha para simulações de spray utilizando o modelo de turbulência RNG k- ϵ e o modelo de atomização KH-RT. Os autores aumentam a quantidade de parcelas introduzidas no domínio na medida em que a malha é refinada, o que pode ser explicado da seguinte maneira: em uma malha grosseira, maior é o volume e a massa do gás na célula da malha a qual uma parcela está inserida, dessa forma a troca de quantidade de movimento com o gás é menor e a parcela se mantém com uma velocidade relativa elevada, aumentando assim a força de arrasto e diminuindo a penetração do spray. Em uma malha refinada, a troca de quantidade de movimento é acentuada, o que faz com que o gás também adquira uma velocidade elevada e diminua a força de arrasto, aumentando a penetração do spray (HINDI, 2018).

No presente trabalho, o refino de malha foi feito apenas aumentando o nível do refinamento adaptativo baseado na velocidade. Foram testadas então, quatro configurações de malha e quantidade de parcelas inseridas:

- AMR com 1 nível (2,0 mm) e 77.000 parcelas
- AMR com 2 níveis (1,0 mm) e 623.000 parcelas
- AMR com 3 níveis (0,5 mm) e 2485.000 parcelas
- AMR com 4 níveis (0,125 mm) e 4900.000 parcelas

3.3 – Motor monocilindro de pesquisa

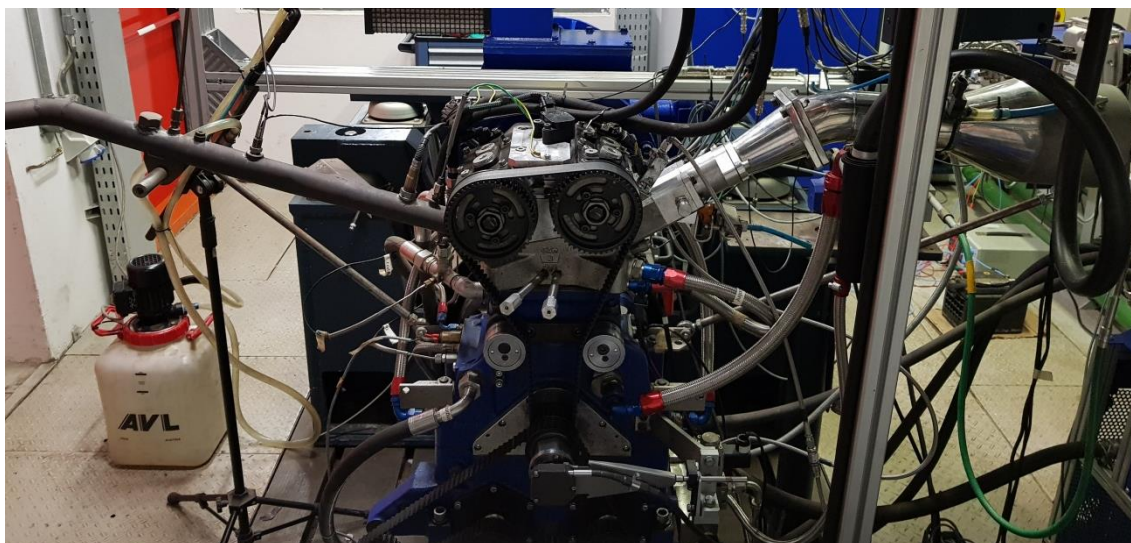
As simulações 3D de motores foram feitas com base no motor monocilíndrico de pesquisa da AVL SCRE (da sigla em inglês, *Single Cylinder Research Engine*) modelo 5496. Ele permite alteração na razão volumétrica de compressão e no enquadramento do diagrama de abertura e fechamento de válvulas mecanicamente. Além disso, esse motor permite um melhor controle das variáveis de operação, como por exemplo, temperatura da água e do óleo, temperatura do ar da admissão, vazão mássica de ar, que, aliado com o fato de ser apenas um cilindro, leva a um controle de quase todos os parâmetros do motor, tornando-o ideal para estudos de combustão. A Figura 3.3 mostra a instalação física do motor na sala dinamométrica. Ele é um motor de quatro tempos, ignição por centelha, com duas válvulas de admissão e duas de descarga e permite a opção de injeção direta de combustível na câmara de combustão ou indireta, no duto de admissão. As principais características desse motor estão listadas na Tabela 3.1. Os dois modelos de pistão utilizados nos testes experimentais são mostrados na Figura 3.4. As curvas de levantamento das válvulas de admissão e de exaustão em função do ângulo do eixo do motor foram medidas pela equipe de experimentações do CTM-UFMG e, em todos os testes, não foi variado o diagrama de válvulas. Para aumentar a quantidade de pontos, as curvas de levantamento foram inseridas no programa comercial GT-Power no trabalho de VAZ, 2018 para uma interpolação entre os pontos medidos e aumentar a resolução da curva para serem utilizadas nas simulações 3D. Os pontos experimentais medidos e a curva interpolada pelo GT-Power das curvas de levantamento das válvulas são mostradas na Figura 3.5.

Tabela 3.1 – Principais dimensões do motor monocilindro de pesquisa utilizado nesse trabalho.

Item	Dimensão / Característica
Diâmetro do cilindro	82 mm
Curso do pistão	86 mm
Volume deslocado	454,17 cm ³
Comprimento da biela	144 mm
Descentralização do pino do pistão	0,5 mm
Relações volumétricas de compressão (utilizadas)	11,47:1 e 12:1
Diâmetro das válvulas de admissão	31,1 mm
Diâmetro das válvulas de exaustão	28,0 mm

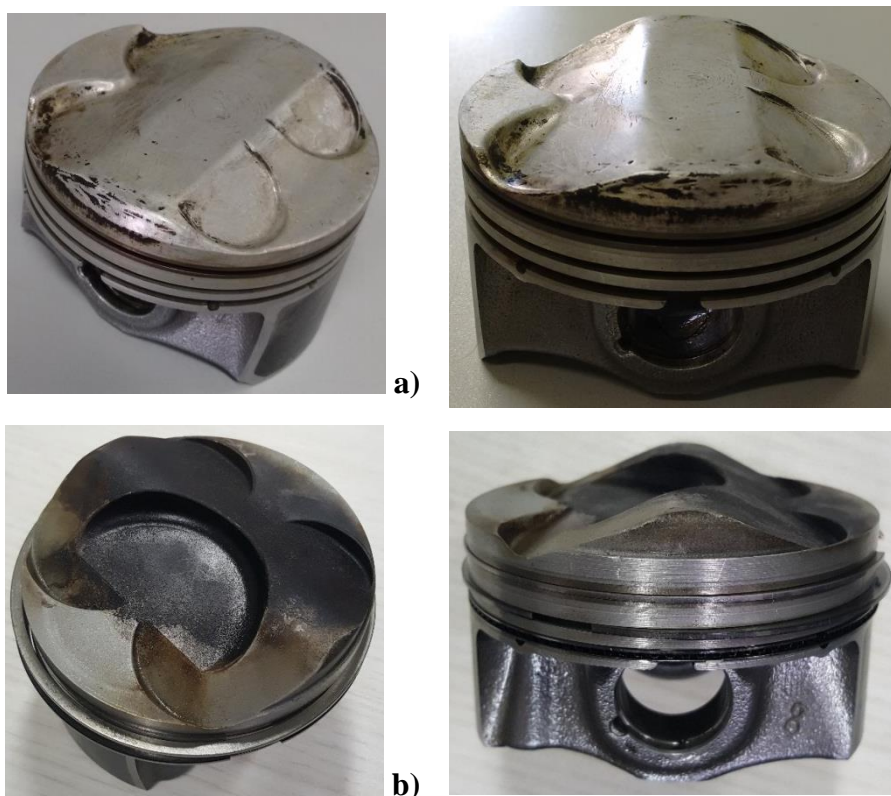
Fonte: cortesia do Centro de Tecnologia da Mobilidade da UFMG

Figura 3.3 – Motor monocilindro de pesquisa (SCRE engine)



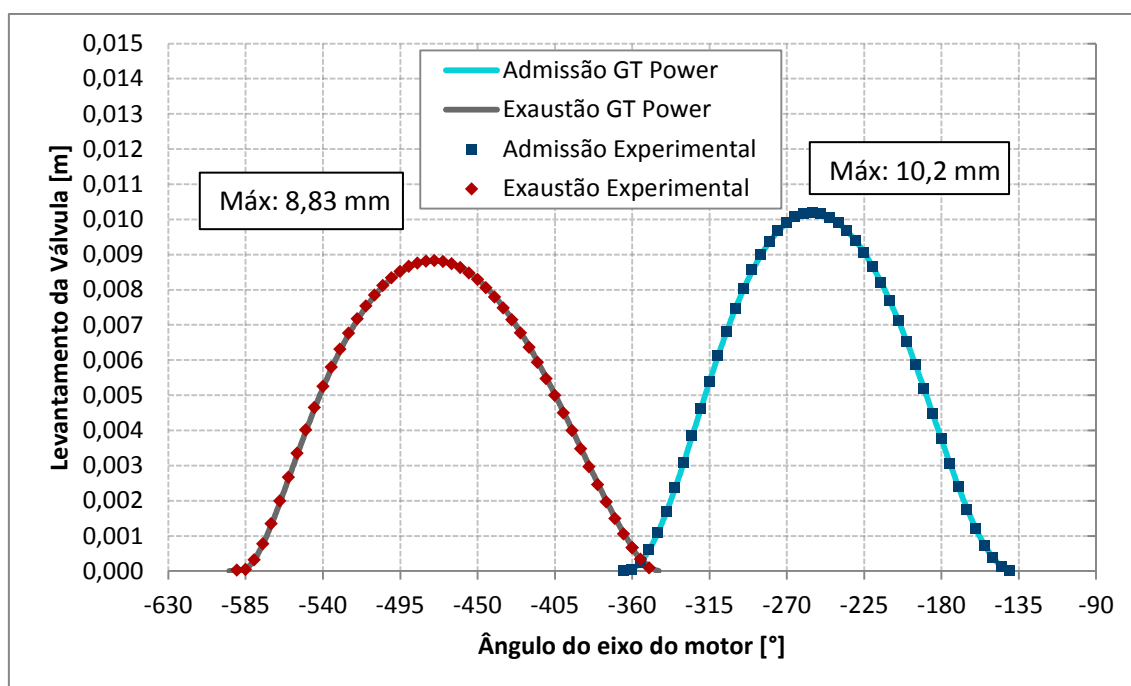
Fonte: cortesia do Centro de Tecnologia da Mobilidade da UFMG

Figura 3.4 – Tipos de pistão utilizados nos testes experimentais e nas simulações 3D: a) Pistão com características de injeção indireta (PFI) utilizado nos testes experimentais da Categoria 1 e b) pistão com características de injeção direta utilizado nos testes experimentais da Categoria 2.



Fonte: cortesia do Centro de Tecnologia da Mobilidade da UFMG

Figura 3.5 – Curvas de abertura e fechamento das válvulas de admissão e exaustão do motor. As curvas com pontos representam as medições feitas pela equipe de experimentações e as curvas contínuas a interpolação obtida pelo programa GT-Power no trabalho de VAZ, 2018.

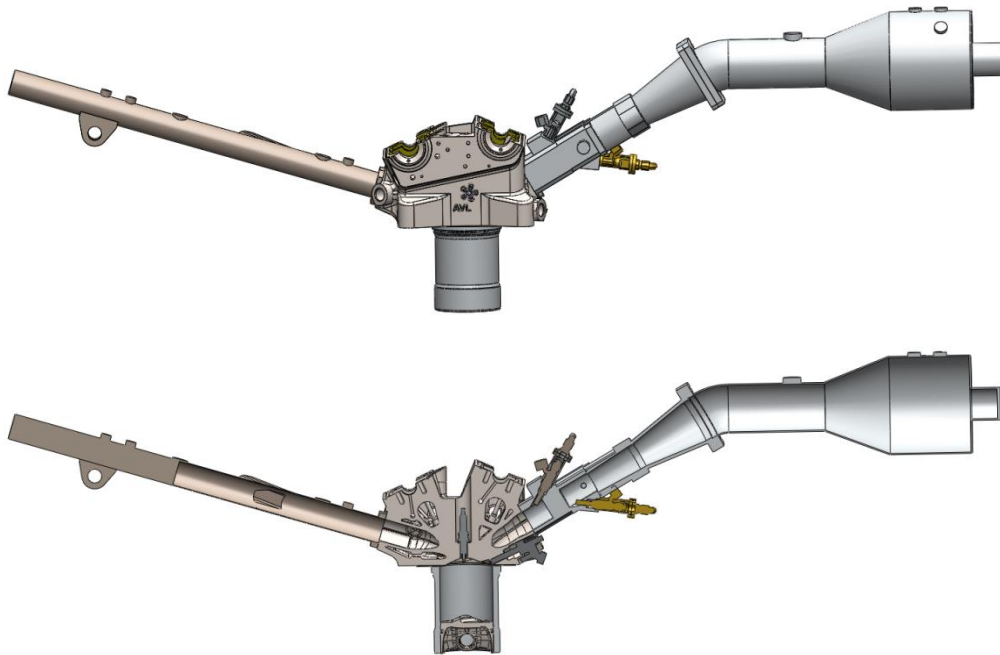


Fonte: autor

3.4 – Domínio computacional

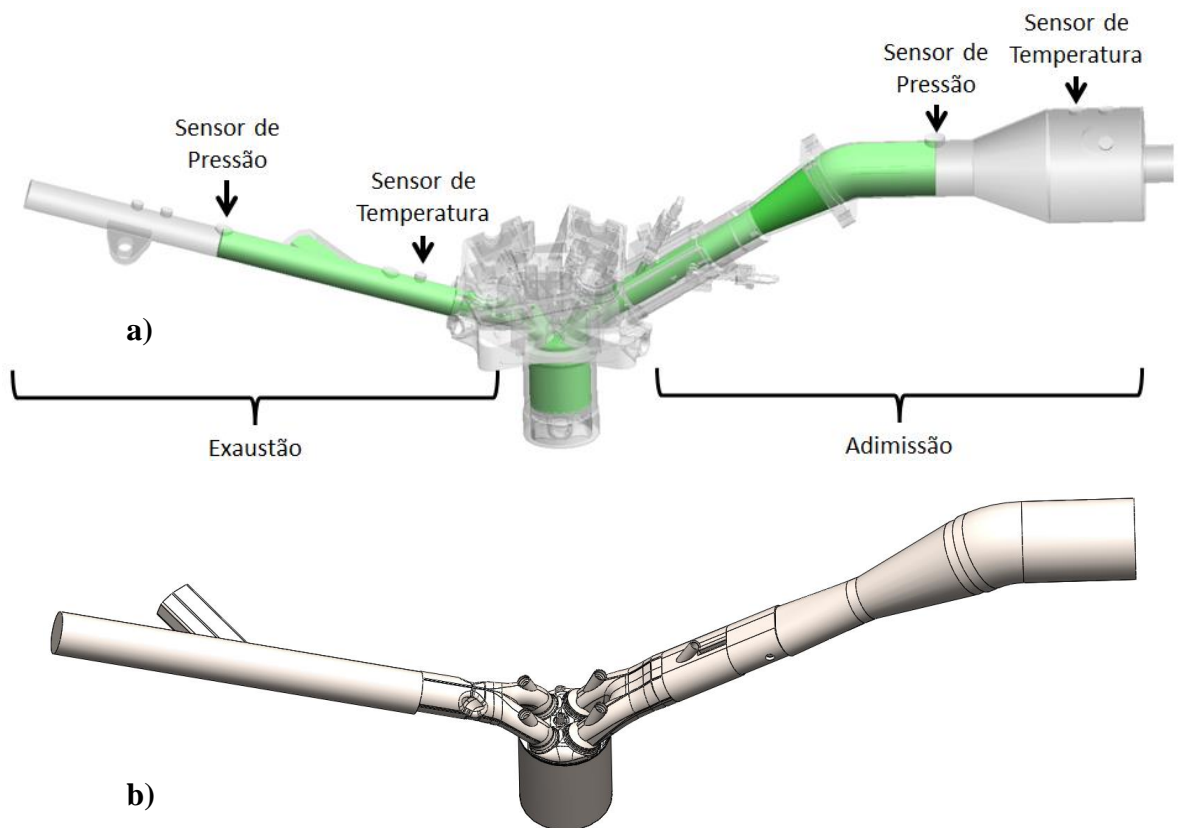
O domínio computacional das simulações 3D se consiste no volume interno dos dutos de admissão e exaustão do motor, assim como o volume interno formado entre o cilindro, cabeçote e pistão. A Figura 3.6 mostra um esquema da geometria do motor e a Figura 3.7 b) mostra o volume interno extraído. As fronteiras do domínio computacional coincidem com os pontos de tomada de pressão nos dutos de admissão e exaustão durante os testes experimentais com o motor. As medições de temperatura não foram feitas na mesma posição das tomadas de pressão, havendo uma distância entre elas conforme pode ser visto na Figura 3.7 a). Priorizou-se, portanto, coincidir as fronteiras do domínio com as tomadas de pressão experimental, uma vez que os resultados das simulações serão mais afetados pela pressão do que pela temperatura do gás (além de não ser muito significativa a variação de temperatura entre o ponto medido e a fronteira considerada).

Figura 3.6 – Geometria 3D do motor monocilindro.



Fonte: autor

Figura 3.7 – Volume interno sobreposto com a geometria do motor e volume interno extraído.

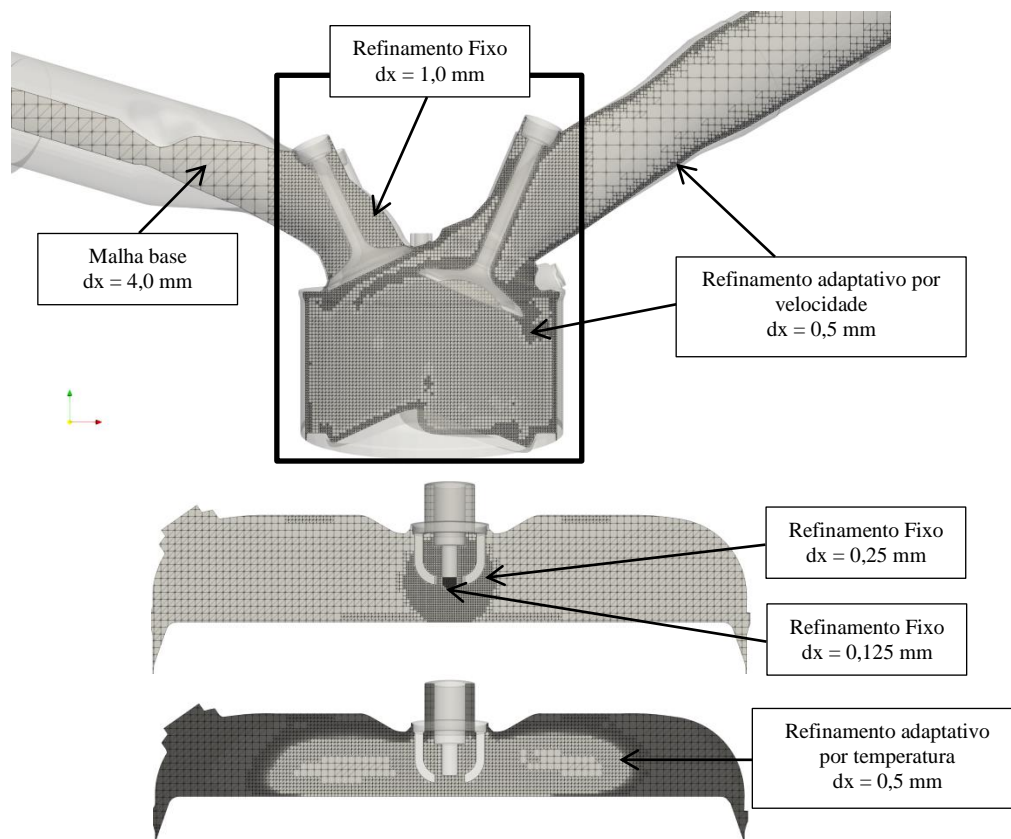


Fonte: autor

3.5 – Parâmetros de malha

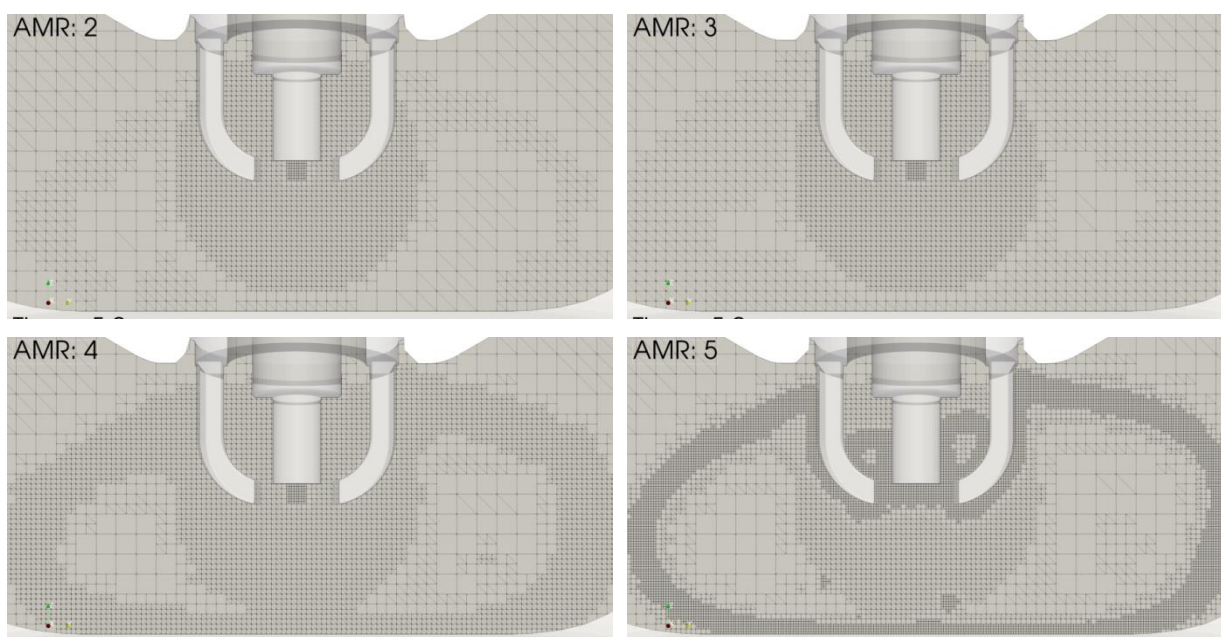
A malha volumétrica utilizada para os cálculos computacionais é feita automaticamente pelo CONVERGE, sendo que o usuário define o tamanho base dos volumes, os refinamentos em áreas fixas do domínio e o refinamento adaptativo. O tamanho base das células da malha foi de 4,0 mm, com 2 níveis de refinamento fixo em uma região com formato hexaédrico, abrangendo a região do cilindro e as válvulas do motor; um refinamento fixo na região dos assentos de válvula com 3 níveis e três camadas de células; dois refinamentos fixos com formato de esfera na região da vela de ignição durante o tempo da centelha: um com 4 níveis de refinamento e diâmetro de 6 mm e outro com 5 níveis e diâmetro de 0,5 mm; outro refinamento fixo com formato de esfera com 1 mm de diâmetro, 3 níveis de refinamento envolvendo todos os sete pontos de injeção do injetor. A imagem da malha resultante é mostrada na Figura 3.8. Além disso, foi utilizado um refinamento adaptativo, durante todo o tempo de simulação, baseado em velocidade, com 3 níveis de refinamento e velocidade de *sub-grid* de 1 m/s e um refinamento adaptativo baseado em temperatura com 3 níveis e critério de 2,5 K durante o intervalo da combustão, para capturar a frente de chama. Conforme pontuado por BRAGA, 2017, a análise de convergência dos resultados ao refino de malha se mostra uma tarefa complexa em simulações de motores de combustão interna. Dessa forma, foi feito um estudo de sensibilidade dos resultados da combustão ao refino da malha da frente de chama, sendo feita uma simulação com 2 e outra com 4 níveis de refinamento do AMR de temperatura. Dessa forma, são avaliadas as curvas de pressão e de taxa de liberação de calor no cilindro e a temperatura ao longo de uma linha que atravessa a frente de chama (segundo a metodologia apresentada em HINDI, 2011), além de imagens qualitativas de campos de temperatura no motor para as três configurações de malha. Uma imagem ilustrativa das malhas geradas é mostrada na Figura 3.9.

Figura 3.8 – Imagem ilustrativa de uma malha utilizada para os cálculos numéricos com os respectivos refinamentos e o tamanho da malha resultante em cada região.



Fonte: autor

Figura 3.9 – Detalhe no entorno da vela de ignição em um instante durante a combustão evidenciando o refinamento adaptativo baseado em temperatura para as quatro malhas utilizadas no teste de convergência de malha.



Fonte: autor

3.6 – Submodelos utilizados

Em todas as simulações o modelo de turbulência utilizado foi o RNG k- ϵ , sem alteração nas constantes do modelo e com abordagem de alto Reynolds. O tratamento do escoamento próximo às paredes foi feito com a lei de parede e o modelo de transferência de calor com as paredes foi o de O'Rourke e Amsden. A equação de estado foi a de Redlich-Kwong e as propriedades de transporte da mistura gasosa (condutividade térmica e viscosidade) foram consideradas as mesmas para os diferentes combustíveis, mas variando em função da temperatura. As constantes dos polinômios para os cálculos das propriedades termodinâmicas (entalpia, calor específico à pressão constante e entropia) de cada espécie presente no mecanismo de cinética química foram obtidas do trabalho de COTA, 2018.

Para a modelagem do spray de combustível, foi utilizado o modelo de quebra de gota de KH-RT com as constantes ajustadas com base nas simulações de spray em bancada e o método de *blob* para quebra primária das gotas. O modelo de evaporação das gotas foi o modelo de Frossling e a temperatura de cada gota foi considerada constante em função do raio da mesma. Para o cálculo das constantes de difusividade mássica do vapor das espécies de combustível no ar foi feita uma média ponderada pela fração mássica de cada espécie do combustível de acordo com o combustível utilizado (variação da proporção de etanol na gasolina), conforme é mostrado no trabalho de MORAES, 2018. O modelo de dispersão turbulenta utilizado foi o do O'Rourke e as novas parcelas adicionadas ao domínio foram distribuídas uniformemente ao longo do diâmetro de cada orifício do injetor.

Como o injetor simulado é um multiorifícios, a interação de um spray de um orifício com outro é um fenômeno importante, dessa forma foi utilizado o modelo de colisão de gotas de NTC. Em conjunto com esse modelo de colisão, foi utilizado o modelo de Post e Abraham (POST, 2002) para determinar qual fenômeno irá ocorrer em decorrência da colisão: coalescência, colisão tangencial, separação de alongamento ou separação reflexiva. O modelo de arrasto das gotas foi o modelo de TAB de arrasto dinâmico. O perfil de injeção utilizado foi um perfil trapezoidal simplificado, uma vez que essa é uma informação de difícil obtenção experimentalmente e também não ser informada na folha de dados do injetor. O tempo de injeção, massa injetada, pressão de injeção e temperatura do combustível e coeficiente de descarga do injetor variam para cada caso simulado.

Para a modelagem da interação das gotas com as paredes da câmara de combustão foi utilizado um modelo de formação filme líquido de O'Rourke e Amsden e o modelo de *Splash* de O'Rourke baseado no número de Weber. Nessa etapa do trabalho, foram testados três modelos de *splash*: O'Rourke, Bai-Gosman e Kuhnke. Os resultados de pressão no cilindro das simulações com os diferentes modelos são comparados com os resultados experimentais de um caso com Gasolina E27 e o modelo mais satisfatório é considerado o que apresenta resultados mais próximos dos experimentais.

Para modelar as fases da centelha elétrica, *breakdown*, *arc* e *glow discharge*, foram utilizados termos fontes de energia entre os eletrodos da vela. Como a fase de *breakdown* e *arc* tem características parecidas em termos de energia, para a modelagem numérica, elas foram incorporadas em uma fase só. Dessa forma, dois termos fontes em formato esférico foram utilizados, um representando a fase de *breakdown/arc* e outro para a fase de *glow discharge*. O primeiro tem formato esférico com diâmetro de 0,5 mm, 32 mJ de energia e duração de 0,5° do eixo do motor. O segundo termo fonte também é uma esfera com mesmo diâmetro e energia do anterior, porém, com duração de 1,0 milissegundos. Tanto a energia da centelha quanto sua duração foi estimada com base em dados experimentais de tempo de centelha (realizados pela equipe experimental anteriormente) e em dados da bobina. A ambos os termos fontes é permitido um deslocamento máximo de 1,0 mm devido aos efeitos do escoamento.

A combustão foi modelada utilizando o modelo SAGE do CONVERGE de cinética química detalhada, dessa forma, os mecanismos avaliados foram inseridos no programa no formato CHEMKIN. Para reduzir tempo de cálculo das simulações o SAGE só foi ativado 5° do eixo do motor antes do instante da centelha e foi desativado no instante de abertura da válvula de exaustão do motor, sendo as reações químicas que ocorrem fora do intervalo de combustão não é objetivo deste trabalho. Todos os mecanismos de cinética química que foram utilizados são citados na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 – Mecanismos de cinética química utilizados nas simulações 3D nesse trabalho para oxidação dos combustíveis.

Nomenclatura utilizada neste trabalho	Número total de espécies	Número total de reações	Referência
66E	66	215	ABIANEH, 2014
75E	75	343	COTA, 2018
115E	115	650	COTA, 2018
ROHL	38	228	ROHL & PETERS, 2009

Fonte: autor

3.7 – Condições de contorno e iniciais

As condições de contorno utilizadas nas fronteiras de admissão e exaustão foram curva de pressão média prescrita na fronteira, variando durante o intervalo de um ciclo do motor (720° do eixo do motor) e temperatura média constante durante o ciclo. Para as simulações dos casos nos quais foi medida experimentalmente tanto a pressão no coletor de admissão, quanto no coletor de exaustão, em função do ângulo do eixo do motor, a própria curva medida foi inserida como condição de contorno. Para os casos em que não houve medição experimental de pressão no coletor de exaustão, foram utilizados resultados de simulações unidimensionais utilizando o programa GT-Power, obtidos do trabalho de VAZ, 2018. A temperatura e a pressão no coletor de admissão foram, para todas as simulações, os valores medidos experimentalmente.

Mais adiante, foi utilizada na fronteira de admissão a fração mássica das espécies entrando no domínio para condição de contorno de espécie. Foi considerando que apenas ar atravessa a fronteira de admissão, composto de 23% de O₂ e 77% de N₂ em massa. A intensidade de turbulência do escoamento na fronteira foi definida como 2% e a escala de comprimento de 0,003 metros. Já na fronteira de exaustão, não são inseridas as espécies, nem a intensidade turbulenta e nem a escala de comprimento do escoamento que deixa o domínio (utilizando, portanto condição de derivada nula), mas sim dos gases que retornam da fronteira de exaustão em direção ao cilindro, se o gradiente de pressão for favorável para isso. A composição dos gases de retorno foi definida como 1,5% de O₂, 71,68% de N₂, 17,1% de CO₂, 7,9% de H₂O, 1,39% de CO e 0,3% de NO. A intensidade turbulenta foi de $1,0 \times 10^{-6}$ e a escala de

comprimento de 0,0001 metros. Esses valores foram ajustados com base em resultados anteriores de simulações com características próximas e com mecanismo de ABIANEH, 2014, após rodarem sete ciclos do motor. Durante o andamento das simulações, foi visto que as condições iniciais possuem um impacto decisivo sobre os resultados da combustão do primeiro ciclo, que impacta diretamente os próximos ciclos da simulação. Se elas forem mal escolhidas, as simulações podem levar vários ciclos até que as curvas de pressão no cilindro se estabilizem ou até mesmo não apresentar convergência para um valor médio.

As temperaturas das paredes do motor foram estimadas com base em conhecimentos prévios de dados experimentais de outros motores, por ser uma variável de complexa mensuração no motor real e os resultados das simulações unidimensionais (como as obtidas no programa GT-Power por VAZ, 2018) superestimarem as temperaturas (uma vez que a troca de calor com as paredes é um fenômeno inerentemente tridimensional e fortemente influenciado pela turbulência). A temperatura média de cada fronteira do tipo “parede” no domínio é mostrada na Tabela 3.3.

Tabela 3.3 – Condição de contorno de temperatura nas paredes do motor.

Fronteira	Temperatura [K]
Pistão	450
Camisa do cilindro	450
Cabeçote	450
Vela de ignição	550
Eletrodo da vela de ignição	550
Coletor de admissão	425
Coletor de exaustão	500
Válvula de admissão	450
Válvula de exaustão	525

Fonte: autor

O ponto morto superior de combustão é definindo como sendo o 0° de referência no ciclo, tanto para os dados experimentais, quanto para os das simulações. O início das simulações foi definido no momento de abertura da válvula de exaustão (136,0 ° do eixo do motor), dessa forma, as condições iniciais de pressão no cilindro foram obtidas das curvas de pressão experimental para cada caso. De forma análoga, foi feito para a região de admissão e exaustão (proveniente da curva experimental ou da simulação unidimensional). A condição inicial de temperatura na região da admissão foi considerada a mesma do ar de entrada, na região de

exaustão e do cilindro foi considerada a mesma temperatura medida dos gases de exaustão. As espécies presentes na região do cilindro e de exaustão foram as mesmas definidas nas condições de contorno. Para condição inicial de energia cinética turbulenta e dissipação turbulenta foi utilizado $0,76 \text{ m}^2/\text{s}^2$ e $116 \text{ m}^2/\text{s}^2$ para o cilindro e $0,13 \text{ m}^2/\text{s}^2$ e $9,7 \text{ m}^2/\text{s}^2$ para a admissão e $0,5 \text{ m}^2/\text{s}^2$ e $100 \text{ m}^2/\text{s}^2$ para a exaustão, respectivamente.

Além disso, o instante da centelha, a massa de combustível injetada, a duração da injeção, a temperatura do combustível, o fator Lambda da mistura e as temperaturas do ar nas fronteiras de admissão e exaustão que foram utilizadas nos casos simulados são mostrados na Tabela 3.4.

Tabela 3.4 – Principais dados de entrada que foram utilizados nas simulações

Combustível	E10		E22	
	MBT	Detonação	MBT	Detonação
Instante da Centelha [°]	-18,5	-25	-19,5	-24,5
Início da injeção de combustível [°]	-290	-290	-270	-270
Duração da injeção [°]	29,6	30,1	33,9	33,9
Massa de combustível injetada [mg]	21,5	21,7	23,6	23,6
Pressão de injeção [bar]	80	80	80	80
Temperatura do combustível [K]	306	306	293	293
Fator Lambda Experimental [-]	1,01	0,99	0,99	1,00
Temperatura do ar na admissão [K]	298	298	302	301
Temperatura do gás na exaustão [K]	705	697	973	953
Pressão na fronteira de admissão	Experimental	Experimental	GT-Power	GT-Power
Pressão na fronteira de exaustão	Experimental	Experimental	GT-Power	GT-Power

Fonte: autor

3.8 – Composição dos combustíveis

Como a gasolina é uma mistura de diversas cadeias de hidrocarbonetos, deve-se escolher espécies representantes para as classes de hidrocarbonetos mais presentes nesse combustível. Essa definição da composição de cada combustível é apresentada no trabalho de COTA, 2018. Para os combustíveis utilizados nesse trabalho, a composição é mostrada na Tabela 3.5.

Tabela 3.5 – Fração mássica de cada espécie componente dos combustíveis obtidas no trabalho de COTA, 2018.

Combustível Componente	Fração mássica			
	E10	E22	E27	E100
n-Heptano	0,09938	0,08568	0,08002	0
Iso-octano	0,23392	0,20168	0,18835	0
Tolueno	0,40785	0,35164	0,32840	0
Etanol	0,10388	0,22737	0,27844	0,94984
Água	0	0	0	0,05016
Hepteno	0,15498	0,13362	0,12479	0
Total	1	1	1	1

Fonte: COTA, 2018

3.9 – Configurações de *solver*

No CONVERGE, as variáveis são armazenadas no centro da célula computacional, dessa forma, para prevenir o problema numérico do “efeito do tabuleiro de xadrez” (flutuações de pressão entre as células adjacentes) o algoritmo de Rhie-Chow é utilizado. O algoritmo de acoplamento de pressão e velocidade utilizado foi o PISO (preditor-corretor) com uma tolerância de convergência de $1,0 \times 10^{-3}$ e máximo de 9 iterações. O esquema de interpolação utilizado para o fluxo convectivo das equações de *momentum*, espécies, energia, massa, e passivos é um híbrido entre diferenças centradas e *upwind*. Para a equação de turbulência é utilizado o método puramente *upwind*. O método de solução das equações de conservação é o de volumes finitos e o algoritmo de solução das equações linearizadas utilizado é o SOR (do inglês, *successive over-relaxation*) e a tolerância residual para as equações de conservação de momentum, pressão, densidade, energia e turbulência foram, respectivamente, $1,0 \times 10^{-5}$, $1,0 \times 10^{-8}$, $1,0 \times 10^{-4}$, $1,0 \times 10^{-4}$ e $1,0 \times 10^{-3}$.

Foi utilizado um passo de tempo variável com base no número de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL). Os valores mínimo e máximo do passo de tempo definidos foram de $1,0e-4$ e $1,0e-8$ segundos e os números de CFL de convecção, difusão e Mach foram, 1,0, 2,0 e 50, respectivamente. Nas simulações em que era esperado o fenômeno de detonação, foi estipulado um valor máximo de CFL de Mach de 2,0, uma vez que as flutuações de pressão durante a detonação acontecem em uma escala de tempo muito pequena, o passo de tempo tem que ser suficientemente refinado para capturar esses eventos. O valor de 2,0 foi escolhido com base nos trabalhos de PARK E FURUKAWA, 2015, PAN, 2017 e JAASIM, 2017.

O intervalo de tempo das simulações foi de quatro ciclos do motor, sendo que os três primeiros não foram utilizados nas análises, mas apenas para reduzir a influência das condições iniciais nos resultados. Os resultados das simulações apresentados são, portanto referentes ao quarto ciclo de simulação.

3.10 – Configuração de *hardware*

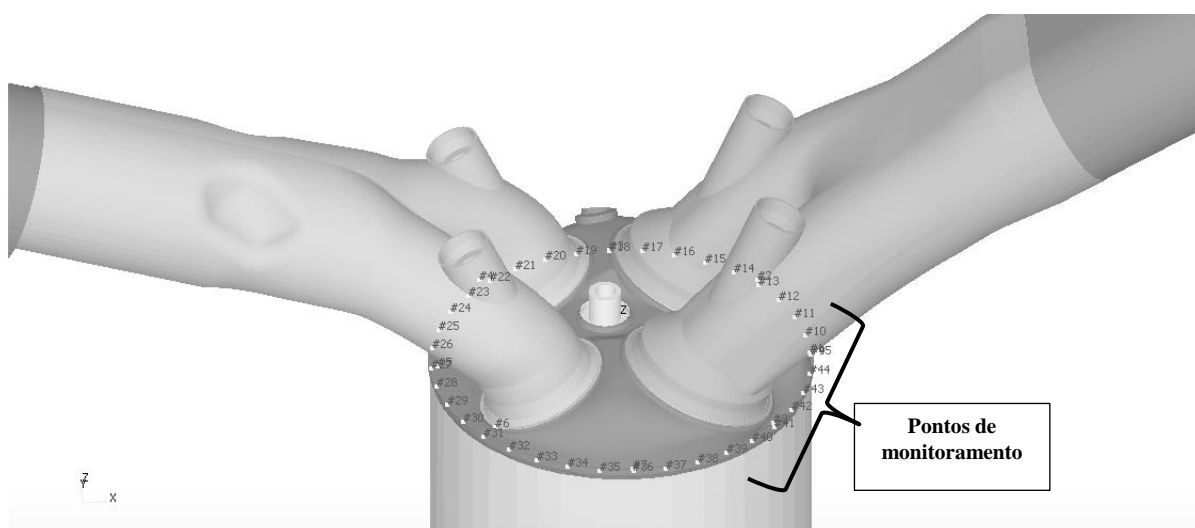
As simulações foram calculadas em dois tipos de servidores: um com 2 processadores Intel Xeon E5-2699 v3 de 2,3 GHz e 18 núcleos e oito módulos de memória RAM de 16 Gb (128 Gb). E outro servidor Intel Xenon E5-2690 v4 de 2,6 GHz e 28 núcleos e com dezesseis módulos de memória RAM de 32 Gb (512 Gb). No primeiro tipo de servidor as simulações 3D do motor foram rodadas com 36 processadores cada e no segundo tipo com 96, cada.

3.11 – Análise de detonação

Alguns detalhes numéricos devem ser levados em consideração para a análise de detonação. Um deles é limitar o número de CFL baseado no número de Mach, como já foi dito. Outra medida é alterar a frequência de salvamento dos resultados de pressão no cilindro de forma a capturar as oscilações de pressão durante a detonação, dessa forma, durante esse intervalo os resultados foram salvos a cada passo de tempo. Além disso, foram inseridos pontos para monitoramento da pressão, distribuídos próximos às paredes da câmara de combustão, uma vez que as flutuações de pressão variam significativamente com a posição no cilindro. A detonação, em geral, tende a ter início nos pontos em que a pressão e a temperatura do gás são mais elevadas, dessa forma as regiões capazes de formar menores volumes de gás não queimado (próximas às paredes) são as mais propensas a iniciarem uma detonação. No total

foram utilizados 45 pontos de monitoramento de pressão, velocidade e temperatura do gás, distribuídos de 8 em 8 graus ao longo do cilindro próximos à face do cabeçote, como mostra a Figura 3.10. Para localizar com mais certeza o local do início da detonação do motor foi utilizada a espécie CH_2O como indicativo nos resultados 3D das simulações, que, conforme observado por BAUERLE *et al.*, 1994 e SUZUKI, 2010, é uma espécie relacionada com a presença de chamas frias. JAASIM *et al.*, 2017, em seu trabalho utilizam o valor de corte de H_2O_2 maior que $4,0 \times 10^{-4}$ pra indicar surgimento de outra frente de chama.

Figura 3.10 – Ponto de monitoramento de pressão, temperatura, velocidade e massa de radicais distribuídos ao longo do cilindro 1,0 mm abaixo da face do cabeçote do motor.



Fonte: autor

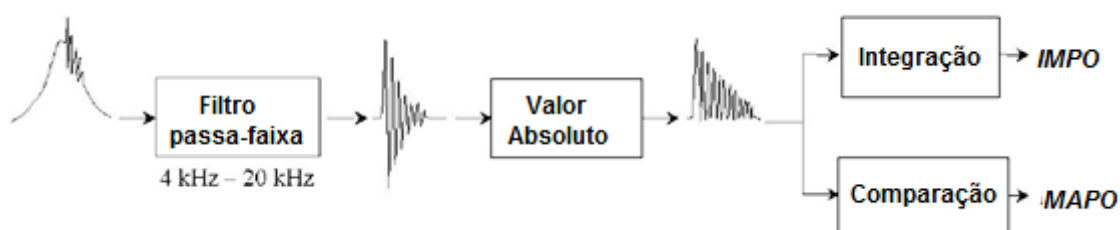
Para caracterizar a presença e quantificar a intensidade da detonação no ciclo do motor, foram utilizados dois indicadores o MAPO (do inglês, *Maximum Amplitude Pressure Oscilations*), que avalia o valor máximo absoluto do sinal filtrado de pressão no cilindro (CAVINA *et al.*, 2006), e o IMPO, que é a integral do valor absoluto do sinal filtrado de pressão, que representa a energia contida nas oscilações de alta frequência do sinal de pressão (ZHEN *et al.*, 2012) mostrados nas Equações (111) e (112).

$$MAPO = \max\left(|\hat{p}|_{\theta_0+\zeta}^{\theta_0}\right) \quad (111)$$

$$IMPO = \int_{\theta_0}^{\theta_0+\zeta} |\hat{p}| d\theta \quad (112)$$

em que θ_0 é o ângulo do eixo do motor correspondente ao início da janela de cálculo e ζ é o intervalo da janela de cálculo, \hat{p} é a pressão no cilindro filtrada. Um esquema da metodologia de cálculo é apresentado por BRECQ e LE CORE, 2005 na Figura 3.11. O critério de corte para definir se o sinal de pressão resultante apresenta sinais de detonação foi o mesmo utilizado por PARK e FURUKAWA, 2015 que é caracterizado como detonação se o valor do MAPO do ciclo for maior que a rotação do motor dividida por 2000. Como os casos de detonação simulados é para a rotação de 3000 rpm, o critério limite de MAPO adotado será 1,5 bar. Esse critério está de acordo com o adotado por BATTISTONI *et al.*, 2017, que utiliza valores de MAPO maiores que 2 como indicadores claros de detonação no ciclo. Segundo PAN *et al.*, 2017, um valor de MAPO de 15 bar representa uma detonação moderada, 40 bar uma detonação intensa e acima de 200 bar uma super-detonação.

Figura 3.11 – Metodologia para cálculo dos índices de detonação MAPO e IMPO.



Fonte: BRECQ e LE CORE, 2005

Para obter o sinal de pressão filtrado, é aplicada uma transformada rápida de Fourier (FFT) na curva de pressão do cilindro. As frequências de corte do filtro de passa faixa utilizadas foram de 2 kHz a 20 kHz.

3.12 – Dados experimentais para comparação

Para comparar os resultados das simulações do motor monocilindro com os diferentes mecanismos de cinética química são utilizadas as curva de pressão no cilindro e da taxa de liberação de calor em função do ângulo do eixo do motor. Para os dados referentes ao caso de avanço de ignição para MBT e limite de detonação, as curvas apresentadas são uma média de 200 ciclos experimentais do motor. Os casos com avanço de ignição 2,5° a mais que o avanço de limite de detonação, as experimentais apresentadas são correspondentes aos ciclos individuais que apresentaram traços de detonação. O dado de massa de ar aprisionada no cilindro experimental foi calculado com base na vazão mássica de ar medido pelo sensor

“*flowsonic*” e verificado com base no valor do fator Lambda, medido experimentalmente com o sensor lambda, e com a massa de combustível injetada por ciclo (ambos os métodos apresentaram resultados similares). A massa de combustível média injetada por ciclo, por sua vez, é calculada com base no consumo horário de combustível, que é calculado pela massa de combustível medida pela balança de combustível no motor e no tempo de prova.

4 - RESULTADOS

Na primeira parte dos resultados é mostrada a calibração das constantes do modelo de quebra de gotas KH-RT, assim como o teste de sensibilidade dos resultados de spray ao refino de malha e quantidade de parcelas introduzidas. Em seguida, são apresentados os resultados de uma simulação 3D do motor monocilindro operando a 2000 rpm, 4 bar de BMEP de carga com combustível E100, com o mecanismo cinético químico de Rohl (ROHL e PETERS, 2009) e as constantes de modelo de quebra de gotas validadas. Na sequência, os resultados qualitativos dos modelos de formação de *splash* em filme líquido de O' Rourke, Bai-Gosman e Kuhnke são mostrados para um caso com gasolina E27. Na segunda etapa dos resultados, é apresentada a comparação dos mecanismos cinéticos-químicos para um caso com gasolina E10, 3000 rpm e 6 bar de BMEP com avanço para máximo torque de eixo (MBT) e com avanço para detonação forçada. Por fim, com o mecanismo cinético químico para caracterização de detonação definido, é apresentado os resultados de uma simulação deste mecanismo com gasolina E22.

4.1 – Validação do modelo de spray em bancada

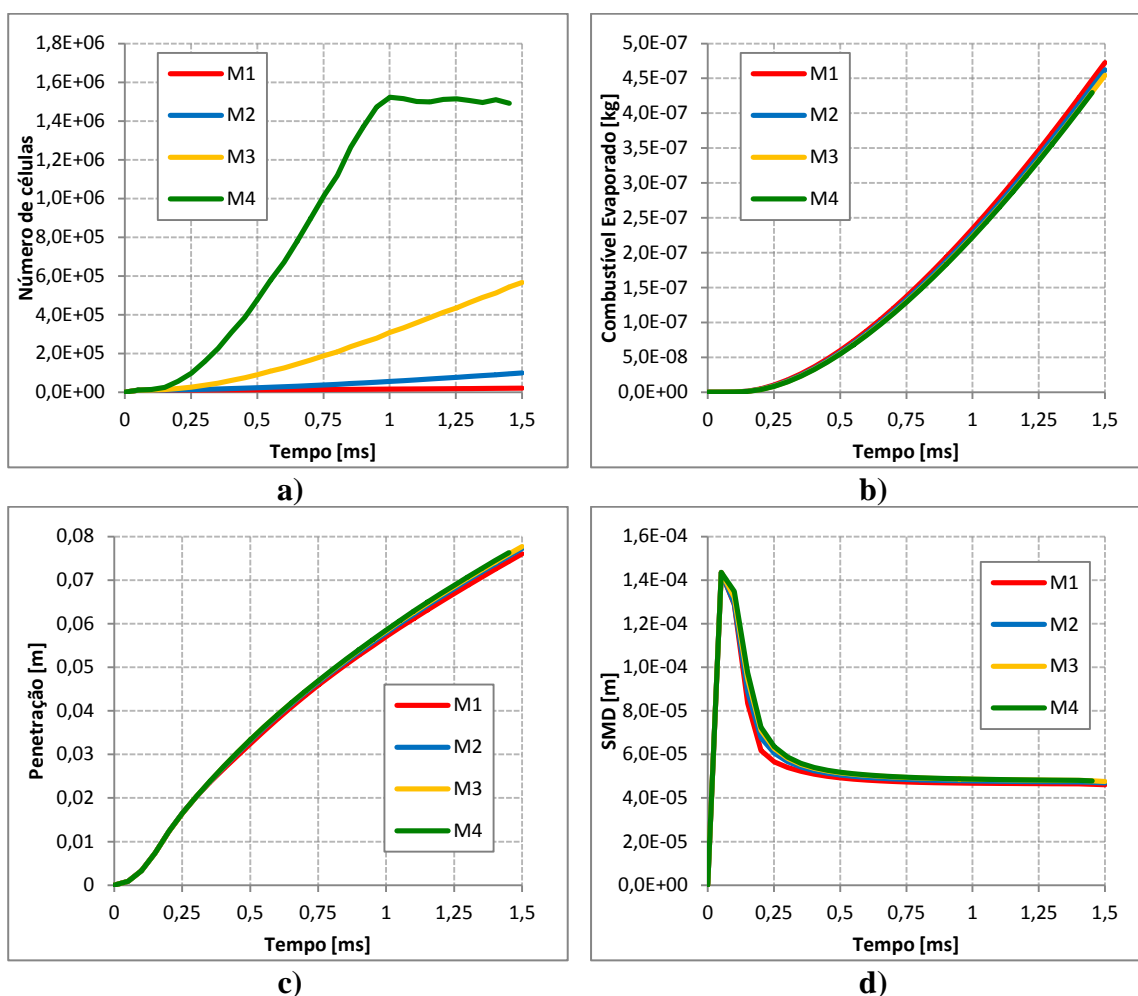
Primeiramente é mostrado o resultado do teste de sensibilidade ao refino de malha das simulações de spray em bancada. Na Figura 4.1 a) é mostrada a quantidade de células no domínio computacional em função do tempo de simulação. Na medida em que o spray se desenvolve e sua penetração aumenta, mais regiões do domínio são refinadas pelo refinamento adaptativo (AMR), por isso o número de células total aumenta com o tempo. Para a malha M1 o número final de células é de 20 mil, para a malha M2, 100 mil, para a M3, 600 mil e para a M4 o número total atinge o limite máximo estipulado de 1,5 milhões. Na Figura 4.1 b), c) e d) são mostrados os resultados de massa de combustível evaporado, penetração do spray e diâmetro médio de Sauter para as quatro malhas, respectivamente. Com base na Figura 4.1 é possível perceber que os resultados são bem parecidos entre as malhas em termos qualitativos. Quantitativamente, a diferença percentual do valor final das variáveis para cada malha em relação à malha mais refinada fica em torno de 4% para malha M1, 1,5% para a M2 e 0,4% para M3. Em seguida, na Figura 4.2 são mostradas imagens da malha (em um plano que corta o spray) e da configuração final do spray (no tempo de 1,5 ms) na vista lateral e inferior do domínio para as quatro malhas simuladas. Com base nas imagens das malhas, é

possível perceber que o refinamento adaptativo fica restrito apenas na direção de interação dos jatos do spray com o ar ambiente, como era esperado. Isso reduz a necessidade de refinar áreas desnecessárias do domínio (sem gradientes elevados) e aumentar muito o custo computacional. Analisando a Figura 4.2, é possível perceber que para a malha M1 a resolução do spray é baixa devido ao baixo número de parcelas introduzidas, na medida em que a malha é refinada e a quantidade de parcelas é aumentada fica até difícil distinguir os jatos individuais do spray na vista lateral, como pode ser observado na malha mais grosseira M1. Além disso, com o refino de malha os vórtices nas laterais dos jatos são melhores representados. Comparando-se a vista lateral do spray da malha mais grosseira e da mais refinada (Figura 4.2 a) e b), respectivamente) é possível perceber que de fato a malha mais refinada tem maior penetração axial do spray para todos os jatos, mas no geral todas as malhas apresentam resultados similares. O tempo computacional em minutos foi de: 2,5, 23,0, 132,0 e 300,0 min para as malhas M1, M2, M3 e M4, respectivamente (utilizando 18 processadores, com tempo total de 1,5 milissegundos). Considerando as diferenças percentuais das malhas em relação a mais refinada, a malha M3 apresenta resultados bem satisfatórios, porém da malha M2 para M3 o tempo computacional aumenta quase seis vezes para reduzir uma diferença de 1,5% para 0,4%, o que não justificaria o custo computacional. Como o AMR baseado na velocidade não é utilizado somente para os cálculos de spray nas simulações do motor completo, mas também nos gradientes de velocidade do escoamento como um todo, preferiu-se utilizar 3 níveis de AMR de velocidade nas simulações.

Em seguida, na Figura 4.3 é mostrado o ajuste de constantes do modelo de quebra secundária de gotas KH-RT, utilizando como base a curva de penetração do spray líquido e de diâmetro médio de Sauter. Infelizmente, dos experimentos realizados por GUZZO, 2012 só foi possível obter imagens qualitativas e calcular a penetração do spray pela técnica de *shadowgraph*, sem medições de diâmetro de gotas. Dessa forma, a escolha da configuração final das constantes do modelo foi feita pela curva de penetração e pelas imagens qualitativas do spray, como é mostrado em BRAGA 2018. Porém, para uma caracterização mais confiável seria necessária a informação experimental de diâmetro de gotas. Conforme mostrado na Figura 4.3 a), quanto maior a constante B1, maiores são os diâmetros das gotas e maior a penetração do spray, o que está de acordo com a Revisão Bibliográfica. Optou-se, portanto por utilizar o valor de $B1=7$, uma vez que tanto para $B1=7$ e $B1=1,73$ os resultados de penetração ficaram bem próximos dos valores medidos e o valor 7,0 ser o sugerido para simulações de injeção direta de combustível pelo CONVERGE. A constante C3, no entanto, teve um efeito bem mais sutil

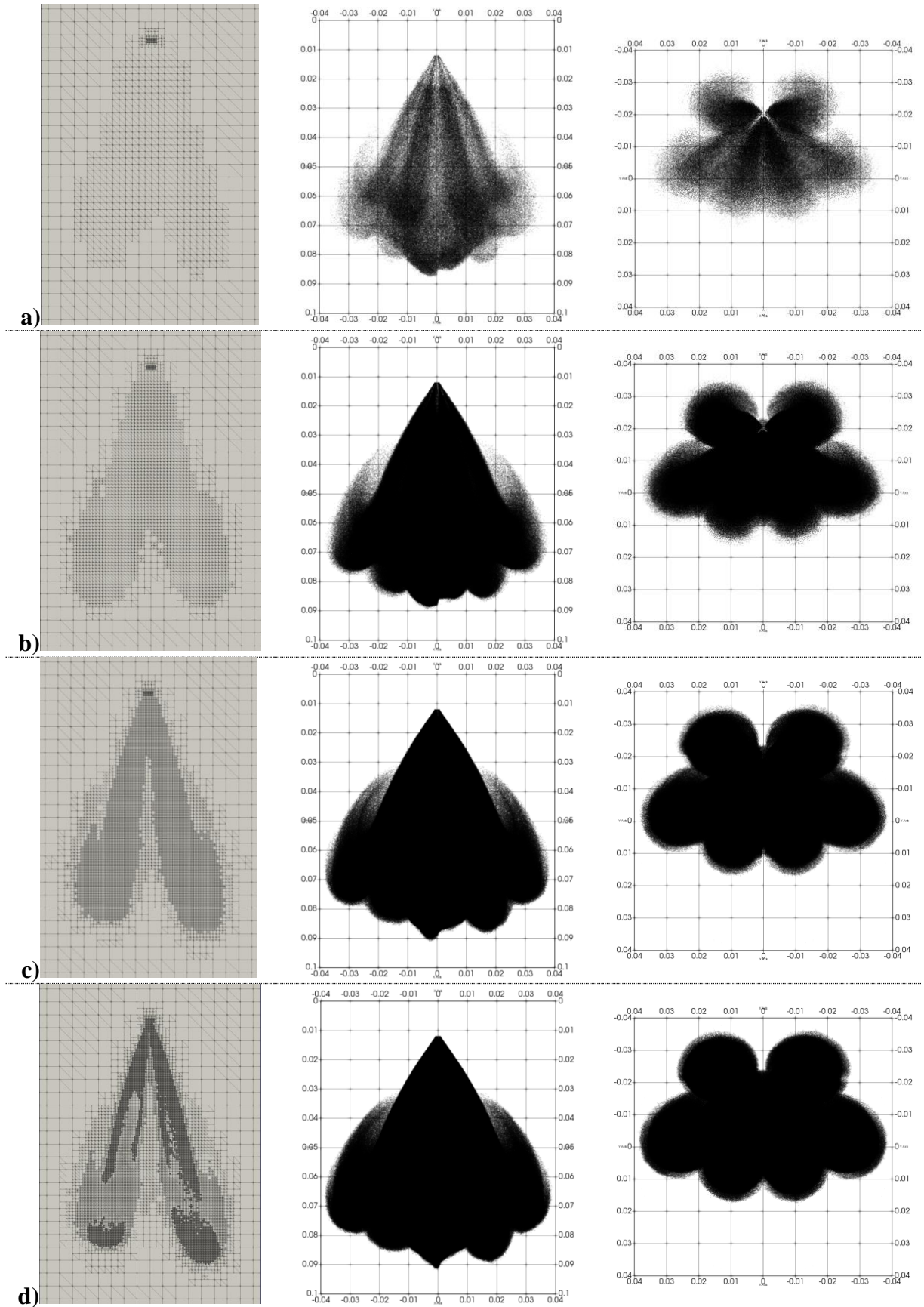
na curva de penetração de líquido do spray, sendo que todos os valores testados deram resultados próximos aos medidos. Porém, na curva de diâmetro médio de Sauter os resultados foram significativamente diferentes, exceto para C3 0,5, 1,0. A escolha do valor dessa constante foi feita, portanto, utilizando as imagens qualitativas do spray, que para $C=0,5$ a caracterização individual de cada jato ficou mais coerente com as imagens experimentais. No gráfico da Figura 4.3 c) é possível perceber que o modelo de quebra RT é bem expressivo logo na saída do injetor (conforme indicado na Revisão Bibliográfica), uma vez que ao utilizar a constante C_b diferente de zero para adiar a participação da quebra por esse mecanismo, as gotas foram consideravelmente maiores e quando o modelo é utilizado em conjunto com o KH desde a saída do orifício, as gotas apresentam diâmetros menores logo no início da curva. Preferiu-se, portanto utilizar ambos os modelos KH e RT de forma competitiva durante toda a injeção ($C_b=0$).

Figura 4.1 – a) Número total de células em função do tempo para as malhas simuladas; variação do resultado de combustível evaporado (b), penetração do spray (c) e SMD (d) para as quatro malhas testas.



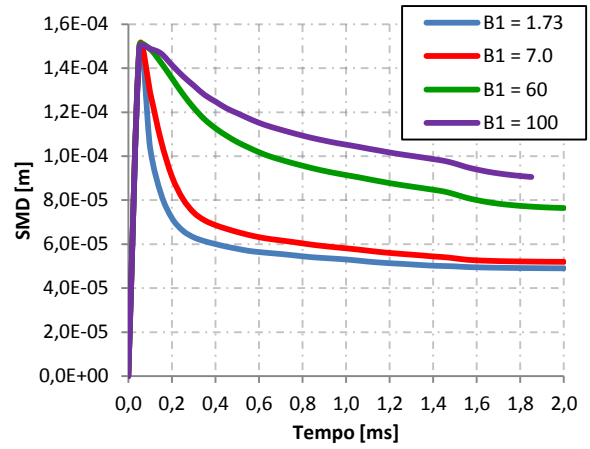
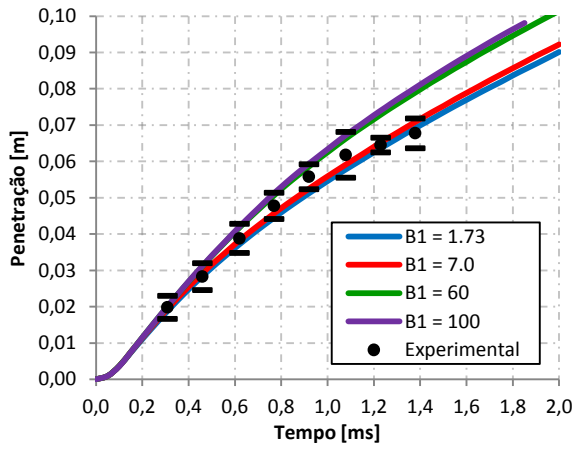
Fonte: autor

Figura 4.2 – Malhas e configuração final do spray na vista lateral e inferior para as quatro malhas utilizadas M1 (2,0 mm), M2 (1,0 mm), M3 (0,5 mm) e M4 (0,125 mm).

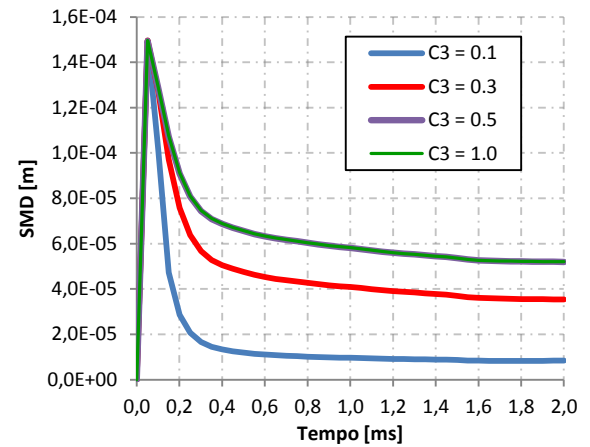
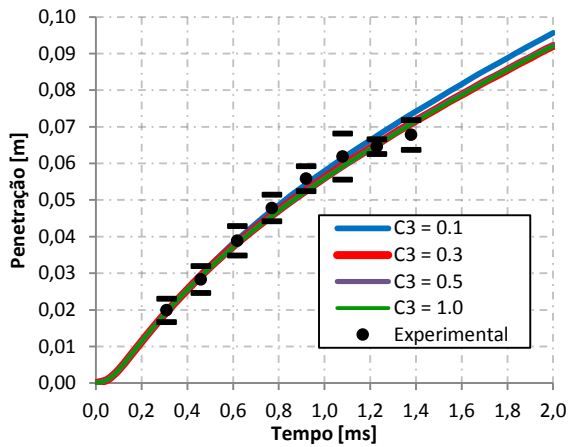


Fonte: autor

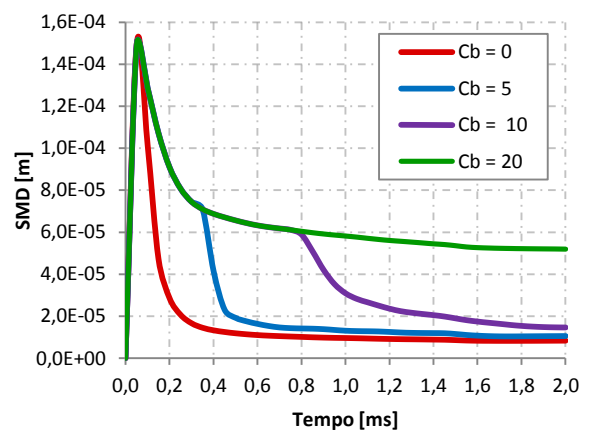
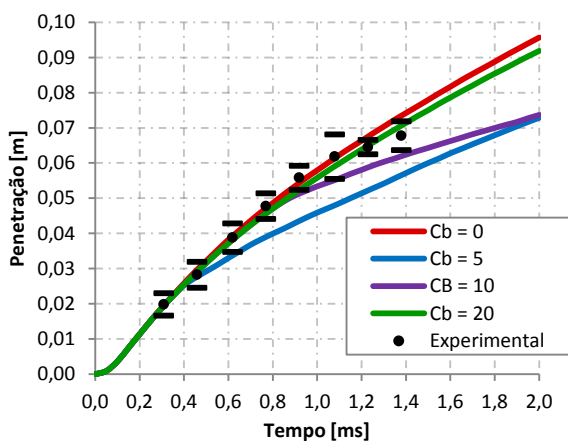
Figura 4.3 – Influência na curva de penetração do spray e diâmetro médio de Sauter (SMD) da constante a) B1 do modelo KH; b) C3 do modelo RT; c) Cb do modelo combinado KH-RT.



a)



b)

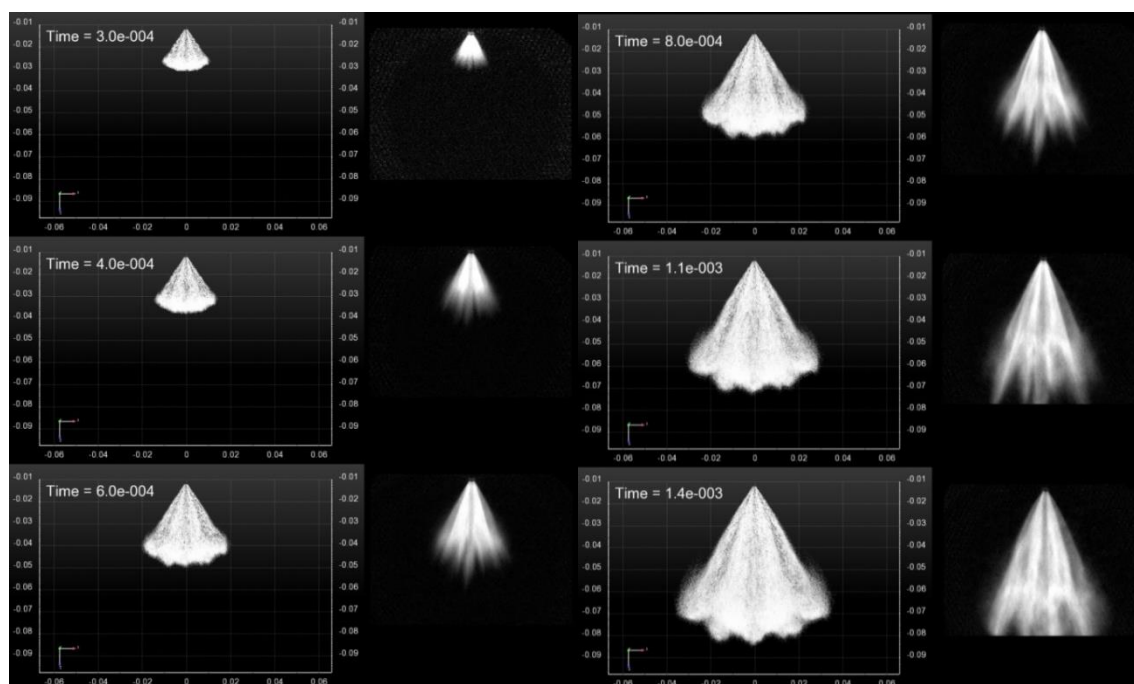


c)

Fonte: autor

A configuração final das constantes do modelo foram então $B1=7$, $C3=0,5$ e $Cb=0$ e a comparação do modelo ajustado com as imagens experimentais é mostrada na Figura 4.4 para diferentes instantes de tempo. Com base nos resultados é possível observar que o modelo de quebra do spray consegue reproduzir o comportamento global do spray formado no experimento. A diferença percentual da penetração de líquido máxima do spray entre o modelo ajustado e os dados experimentais foi menor que 4%.

Figura 4.4 – Comparação qualitativa dos resultados da simulação com modelo ajustado de quebra de gotas KH-RT com imagens experimentais do spray pela técnica de *shadowgraph*.

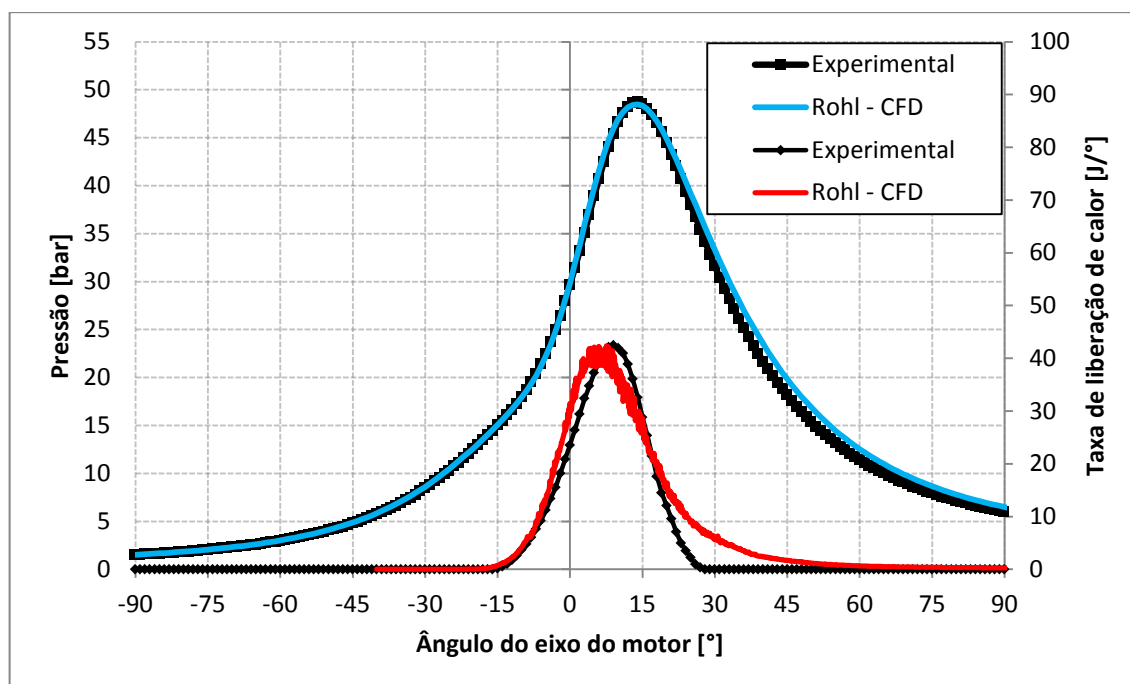


Fonte: simulação: autor; imagens experimentais: GUZZO, 2012

Em seguida, na Figura 4.5 são mostradas as curvas de pressão no cilindro e da taxa de liberação de calor da simulação 3D do motor monocilindro com o modelo de quebra de gotas ajustado na etapa anterior e com o mecanismo de cinética química reduzido de Rohl em comparação com as curvas experimentais para o motor operando com E100, velocidade de rotação do eixo do motor de 2000 rpm e condição de plena carga (8 bar de BMEP). As curvas com marcadores são referentes aos dados experimentais e as curvas contínuas são referentes à simulação. É possível perceber que a simulação conseguiu reproduzir bem os resultados experimentais, tanto de pico de pressão máximo e ângulo no qual ele ocorre quanto de taxa de liberação de calor, embora algumas diferenças na fase do pico e uma queima mais lenta no final da combustão possam ser vistas. A diferença percentual do pico de pressão da simulação e do experimento é inferior a 0,5%, dessa forma, considerando que o mecanismo de queima

de Rohl para o etanol é um mecanismo validado na literatura e que apresenta bons resultados, é possível considerar que o modelo de quebra de gotas foi calibrado adequadamente.

Figura 4.5 – Comparação dos resultados de pressão e taxa de liberação de calor no cilindro para a simulação 3D do motor com mecanismo cinético-químico de Rohl e o modelo de quebra de gotas ajustado e para os dados experimentais.

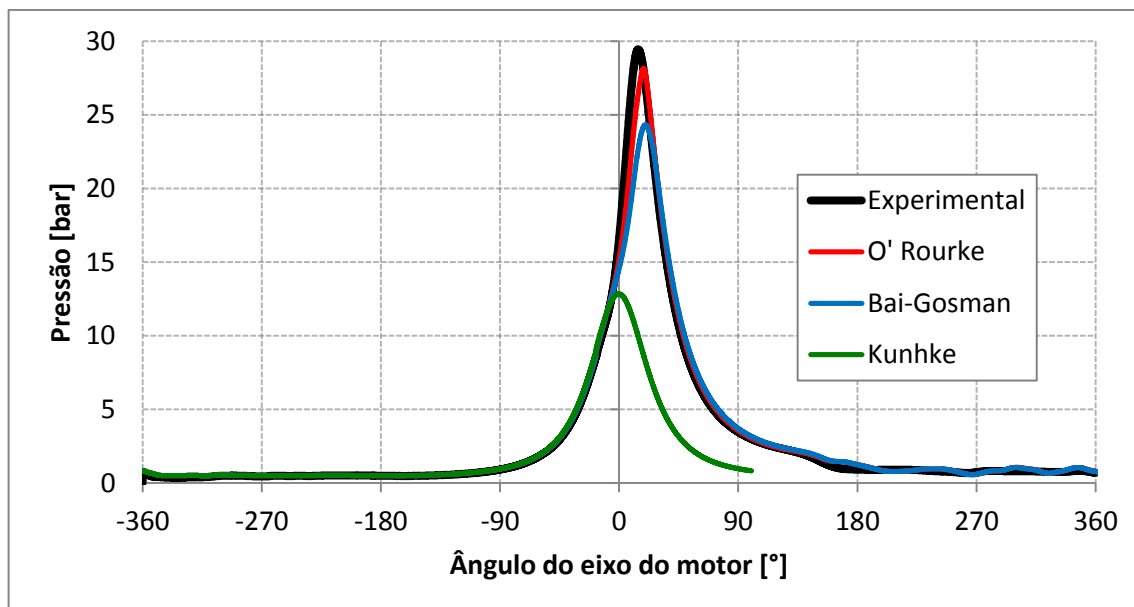


Fonte: autor

4.2 – Modelo de interação das gotas com as paredes

A seguir são mostrados os resultados da avaliação do modelo de interação das parcelas com as paredes do domínio. Na Figura 4.6 é mostrada a pressão no cilindro para os três modelos testados: O' Rourke, Bai-Gosman e Kuhnke mais a curva de pressão experimental para o motor operando com velocidade de rotação do eixo de 2000 rpm, 4 bar de BMEP de carga e gasolina E27. O mecanismo de cinética química utilizado nesse teste foi o mecanismo de 66 espécies da literatura (ABIANEH, 2014). Com base nas curvas de pressão no cilindro das simulações com os diferentes mecanismos é possível perceber que a curva que mais se aproxima do pico de pressão experimental é a da simulação com modelo de O' Rourke, seguida pela simulação com modelo Bai-Gosman e com resultados bem distantes, a com modelo de Kuhnke.

Figura 4.6 – Comparação da curva de pressão no cilindro entre os modelos de formação de filme líquido de O' Rourke, Bai-Gosman e Kuhnke com a curva de pressão obtida experimentalmente.

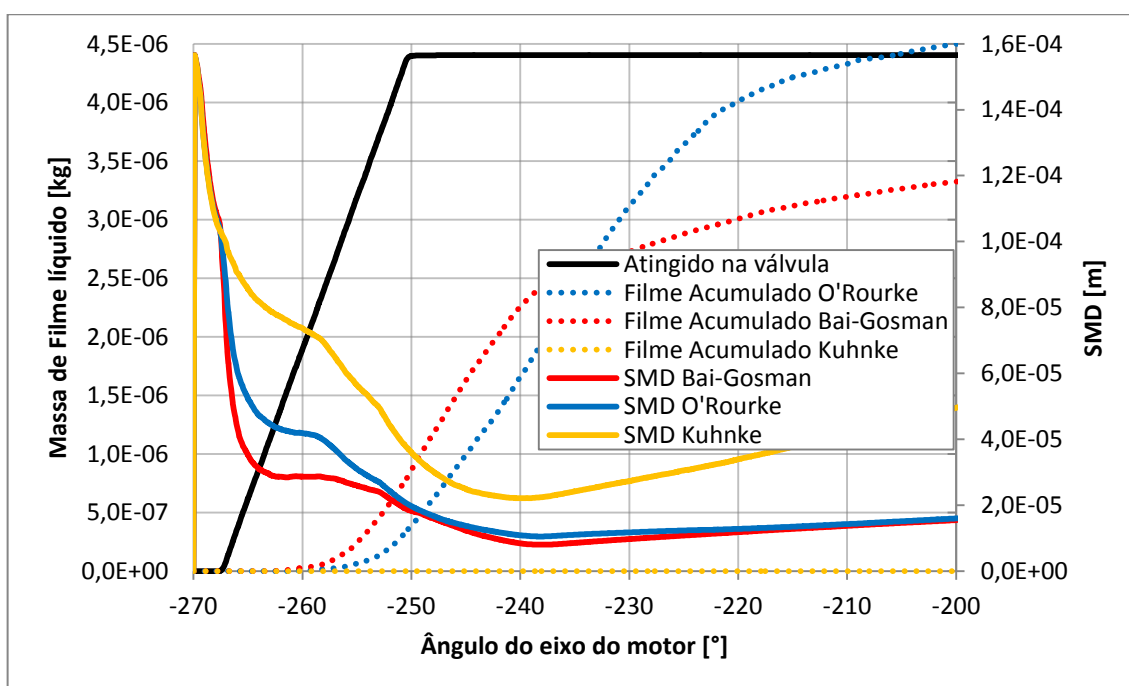


Fonte: Autor

Na Figura 4.7 é mostrada no eixo vertical da esquerda a massa de combustível na forma de filme líquido e as curvas com linhas pontilhadas representam o total de massa das parcelas que atingiram as paredes do motor e formaram filme; a curva de cor preta é a quantidade de massa do spray que atingiu as válvulas de admissão (na Figura 4.7 só é mostrado para um caso, uma vez que a massa que atinge as válvulas é praticamente a mesma para as três simulações com os diferentes modelos). Na medida em que o spray atinge as válvulas de admissão, praticamente nenhum filme líquido é formado nas três simulações; por volta do instante de -255° do eixo do motor começa a formação de filme líquido nos modelos de O' Rourke e Bai-Gosman, mas devido aos demais jatos do spray que atingem a camisa do cilindro e a face do pistão. No modelo de Kuhnke praticamente não há formação de filme líquido. Além disso, ainda na Figura 4.7, no eixo vertical da direita é mostrado o diâmetro médio de Sauter das simulações com os diferentes modelos; a partir do instante em que os jatos começam a atingir as válvulas de admissão (início da rampa da curva preta) é possível perceber uma redução nítida do valor do diâmetro das gotas nas simulações com modelo de Bai-Gosman e O' Rourke, e uma redução bem menos significativa com modelo de Kuhnke. Esse resultado indica que a quebra de gota devido à interação das gotas com as superfícies sólidas prevista pelo modelo de Kuhnke é bem menor do que a dos outros dois modelos, esse diâmetro médio maior das gotas no modelo de Kuhnke reduz excessivamente a evaporação das gotas de combustível, como pode ser visto no gráfico da Figura 4.8. Como resultado, a

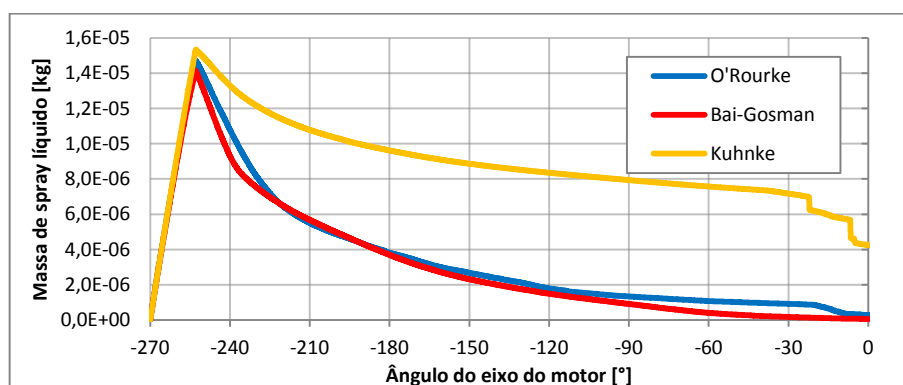
razão de equivalência localmente da mistura no cilindro fica bem diferente da condição estequiométrica e a combustão não é desenvolvida adequadamente. O modelo de Bai-Gosman prevê gotas com menor diâmetro do que o modelo de O' Rourke e conseqüentemente mais combustível é evaporado até o momento de início da combustão. Mesmo tendo menor combustível evaporado o modelo de O' Rourke apresentou resultados mais próximos do ocorrido no caso experimental, e dessa forma, foi o modelo escolhido para as demais simulações realizadas.

Figura 4.7 – Comparação entre os modelos de O' Rourke, Bai-Gosman e Kuhnke na massa acumulada de combustível na forma de filme líquido, massa das parcelas que atingem as válvulas de admissão e diâmetro médio de Sauter.



Fonte: autor

Figura 4.8 – Massa de combustível em forma de líquido na região do cilindro para os três modelos de formação de filme líquido testados.

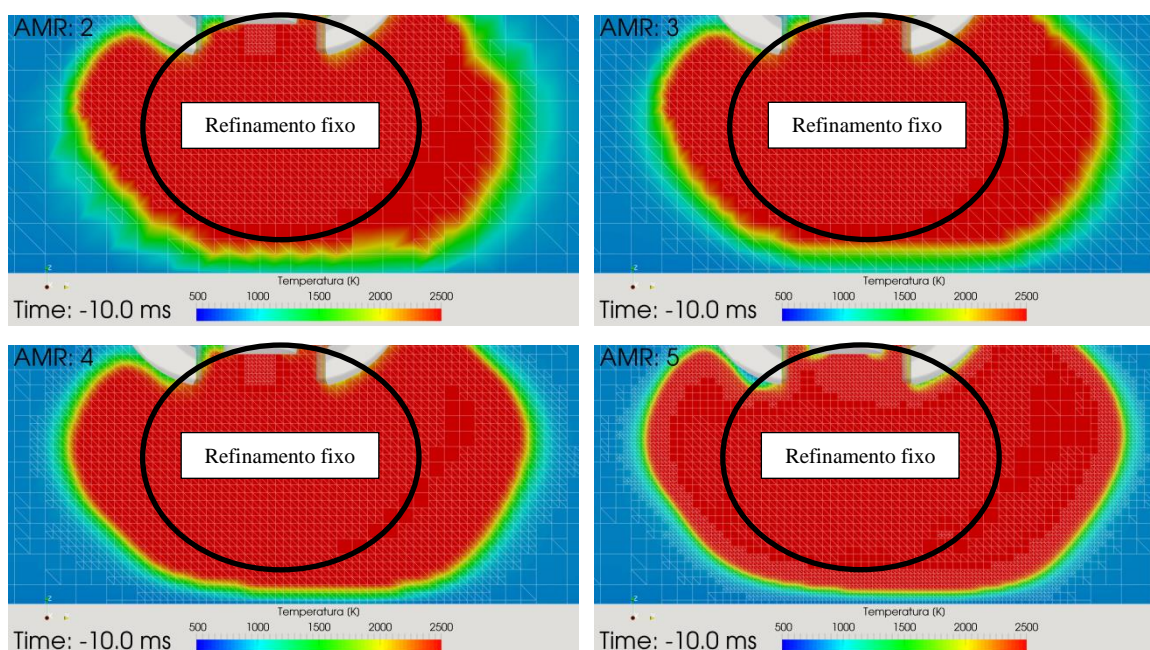


Fonte autor

4.3 – Teste de sensibilidade dos resultados de combustão ao refino de malha.

Na Figura 4.9 é mostrada a distribuição de temperatura em um plano que passa no eixo de simetria do motor bem próximo da região da vela de ignição (indicada pela superfície de cor branca em cima das imagens), dentro da câmara de combustão, no instante de -10° do eixo do motor. A região mais refinada no centro das imagens é resultado do refinamento fixo utilizado no entorno da vela de ignição durante o tempo da centelha para todas as malhas (comprimento da malha nessa região 0,25 mm). A malha referente ao refinamento adaptativo pelo gradiente de temperatura é evidenciada após a frente de chama sair da região de refinamento fixo e o comprimento das células devido ao refinamento adaptativo foi de 1,0 mm, 0,5 mm, 0,25 mm e 0,125 mm para as malhas com AMR 2, 3, 4 e 5, respectivamente. Com base na Figura 4.9, é possível perceber que no mesmo instante de tempo, a frente de chama na malha mais refinada se encontra ligeiramente mais afastada do eletrodo da vela do que nas malhas mais grosseiras.

Figura 4.9 – Imagens da frente de chama sobreposta com a malha utilizada em cada uma das quatro malhas testadas no instante de -10° do eixo do motor.



Fonte: autor

É preciso ressaltar que a malha mais refinada (AMR 5) apresentou instabilidades numérica devido à propagação de erro ao se utilizar uma malha muito refinada e utilizar modelos RANS e só teve resultados até o instante de -5° do eixo do motor. Dessa forma, apenas as outras três malhas efetivamente podem ser utilizadas nas simulações.

Para quantificar as diferenças, foi avaliada a temperatura do gás em função da posição em uma linha que corta a frente de chama nas quatro malhas, esse resultado pode ser visto na Figura 4.10. Os patamares de temperatura no gráfico indicam que esse valor está sendo avaliado na mesma célula da malha e, naturalmente a malha mais refinada possui maior resolução de pontos para uma mesma distância, captando melhor a variação de temperatura. Além disso, existe uma diferença significativa entre a malha mais grosseira e as outras malhas no quesito de espessura de frente de chama. Considerando o comprimento em que a temperatura dos gases não queimados (~ 860 K) e dos gases queimados (~ 2600 K) que são vistas na malha mais grosseira fica entre $-0,015$ e $-0,012$, para as outras malhas isso acontece entre $-0,015$ e $0,0125$, sendo que a AMR3 já fornece resultados bem similares à AMR4. A diferença entre elas ocorre no gradiente de temperatura na frente de chama. Mais adiante, na Figura 4.11 são mostradas as curvas de pressão e de taxa de liberação de calor em função do refino de malha. É possível perceber claramente que os resultados das malhas de AMR 2 e 3 são próximos, mas os da malha com AMR 4 são significativamente diferentes, como por exemplo, o valor do pico de pressão: 48,9, 47,9 e 44,5 bar para as malhas de AMR 2, 3 e 4, respectivamente. Esses resultados indicam que a convergência com refino de malha não foi obtida e para uma afirmação mais segura de que os resultados convergiram para os valores próximos aos da malha AMR4 seria necessário os resultados da malha mais refinada AMR5 (que não foi possível). Na Figura 4.12, é mostrado o tempo computacional multiplicado pela quantidade de processadores utilizados para rodar cada configuração de malha (as simulações rodaram de -40° a 140° do eixo do motor, ou seja, somente durante a combustão), uma vez que para as simulações das malhas de AMR 2, 3 foram utilizados 18 processadores e para as malhas de AMR 4 e 5, 96 processadores. Esse resultado, portanto é um tempo fictício de horas para efeito de comparação do esforço computacional entre as malhas. O tempo real de simulação em horas é indicado acima de cada coluna no gráfico. É possível notar que a malha com AMR4 teve um esforço computacional aproximadamente sete vezes maior que das outras duas malhas e considerando que o tempo médio por ciclo de uma simulação com AMR3 é de 92 horas, utilizar 4 níveis de refinamento tornou-se proibitivo. Dessa forma, utilizou-se 3 níveis de refinamento nas simulações posteriores, devido a limitações de hardware e pela espessura de frente de chama já ter sido bem caracteriza com AMR3.

Figura 4.10 – Curva de temperatura do gás ao longo da linha partindo da região de gases não queimados até a região de gases queimados, cortando a frente de chama para as quatro malhas avaliadas

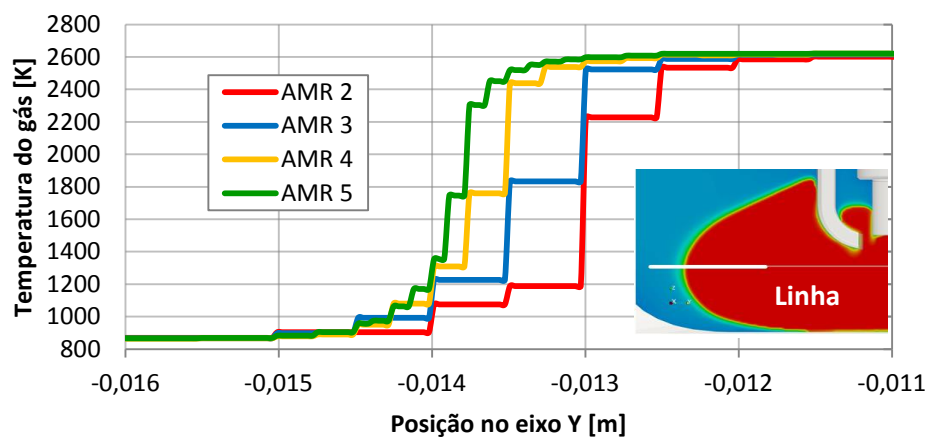


Figura 4.11 – Curvas de pressão no cilindro e taxa de liberação de calor durante o intervalo de combustão para as malhas avaliadas. A malha mais fina, com AMR 5, divergiu por volta de -5° do eixo do motor.

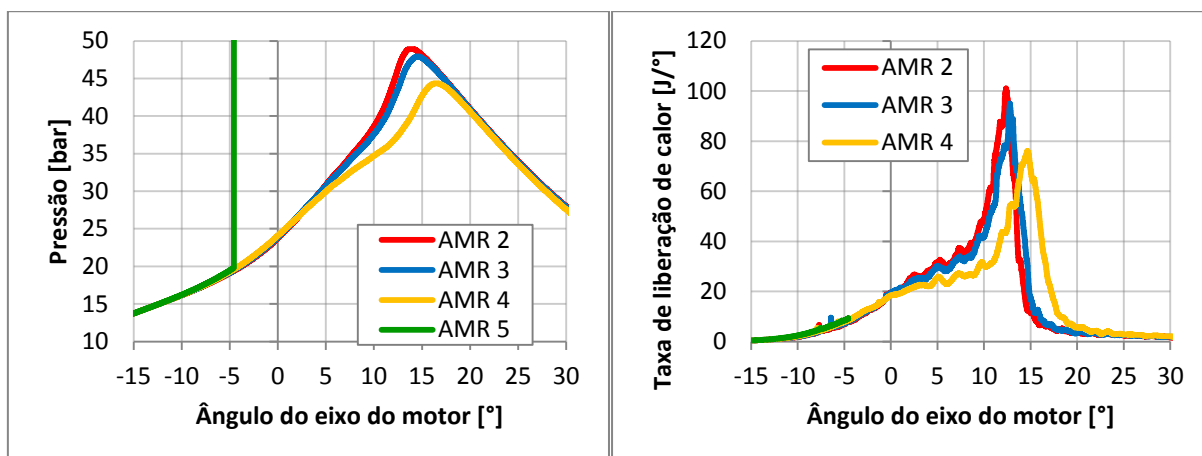
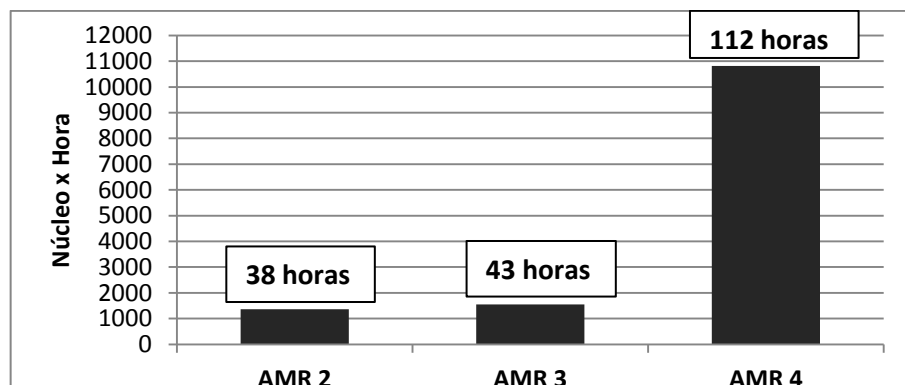


Figura 4.12 – Valores de quantidade de processadores vezes horas de simulação para as três malhas que completaram a simulação. O tempo real de simulação é mostrado na caixa acima de cada barra no gráfico.

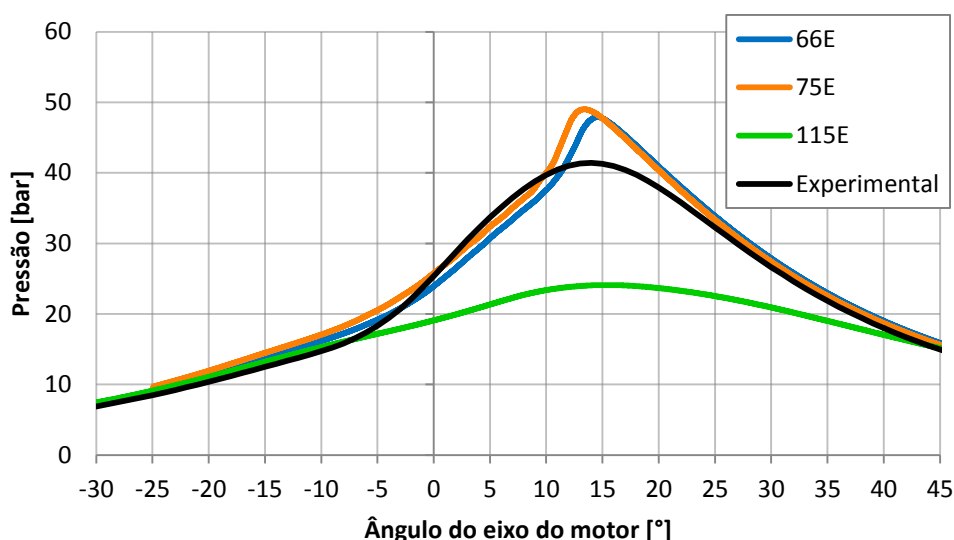


4.4 – Análise de detonação

4.4.1 – Casos com avanço de ignição para MBT

Nessa seção, são mostrados os resultados dos casos para avaliação da sensibilidade dos mecanismos cinético-químicos utilizados quanto ao caráter preditivo de detonação. Na Figura 4.13, os resultados da curva de pressão no cilindro do caso com o avanço de ignição condicionado para máximo torque de eixo (MBT) das três simulações com os mecanismos de 66, 75 e 115 espécies e a curva dos dados experimentais são mostradas.

Figura 4.13 – Curvas de pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do motor para os três mecanismo testados em conjunto com a curva de pressão medida experimentalmente para o caso com avanço para máximo torque de eixo.

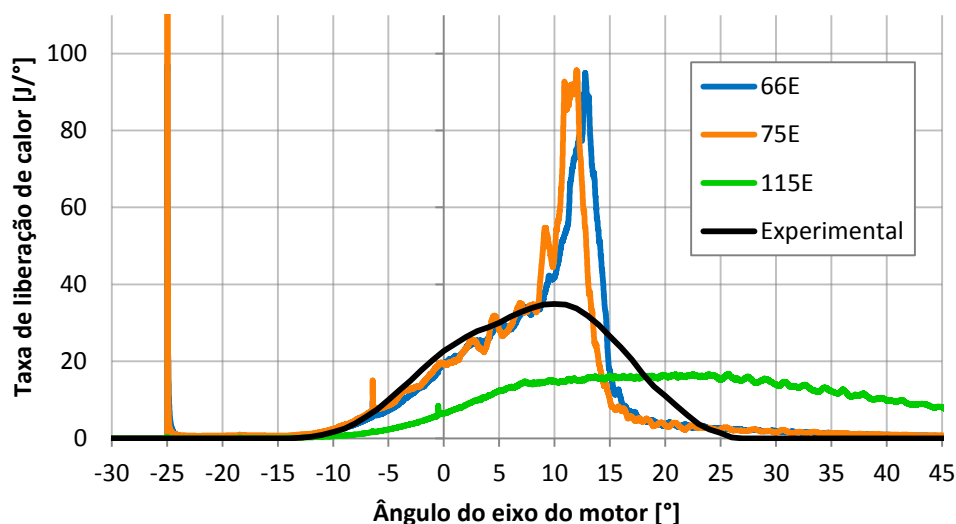


Fonte: autor

Os resultados mostrados nesse trabalho referentes à condição de MBT são escopo do trabalho feito por VAZ, 2018, o qual estuda detalhadamente os principais parâmetros relacionados com o desempenho global de combustão dos mecanismos. O objetivo de mostrar a curva de pressão no cilindro, juntamente com a curva de liberação de calor, Figura 4.14, para o caso de MBT neste trabalho é, portanto, evidenciar que mesmo para o caso que não era esperado detonação, todos os mecanismos apresentam um “segundo pico” de liberação de calor por volta do instante de 8° do eixo do motor, indicando uma combustão extremamente rápida do restante da mistura que ainda não havia sido queimada (que é bem característico de um evento de detonação). Conseqüentemente, a pressão no cilindro que estava acompanhando bem a

curva experimental, apresenta um incremento abrupto também por volta de 10° do eixo do motor.

Figura 4.14 – Curvas de taxa de liberação de calor em função do ângulo do eixo do motor para os três mecanismo testados em conjunto com a curva calculada com base na pressão experimental e um modelo quasi-dimensional para o caso com avanço para máximo torque de eixo.



Fonte: autor

É possível notar pelas curvas de pressão no cilindro que os mecanismos de 66 e 75 espécies apresentaram resultados próximos uns dos outros, porém o mecanismo de 115 espécies apresentou um pico de pressão bem inferior ao experimental (24,1 bar contra 41,4 bar). Resultado similar é visto na curva da taxa de liberação de calor, mostrada na Figura 4.14, com mecanismo de 115 espécies apresentando uma queima muito lenta e com a curva bem abaixo da curva calculada com os dados experimentais. Na Figura 4.14 é possível notar um pico na taxa de liberação de calor em todas as simulações no instante de -25° do eixo do motor. Esse pico ocorre no instante de ativação do modelo de cinética química, no qual uma pequena parcela da mistura libera uma quantidade de energia repentina, mas que não é suficiente para provocar uma autoignição (fato comprovado pela curva de temperatura máxima no cilindro que não chega a sofrer um incremento de 10 K e também pela própria curva de taxa de liberação de calor que só começa a apresentar valores significativos por volta do instante de -12° do eixo do motor).

Para auxiliar no entendimento da diferença significativa de comportamento entre o mecanismo de 115 espécies e os outros, a massa de ar aprisionada no cilindro para o

experimento e para as simulações são mostradas na Tabela 4.1. O fator lambda global para cada caso foi calculado considerando a massa de ar aprisionada, a massa de combustível injetada e a relação ar/combustível estequiométrica (14:1 para o E10 e 12,9 para o E22). É possível observar que as simulações com os mecanismos de 66 e 75 espécies apresentam uma massa de ar 3% menor que a massa de ar experimental, operando em uma situação com lambda de 0,97 (ligeiramente rica). Já a simulação do mecanismo com 115 espécies a massa de ar foi 1,3% menor que a experimental. É importante ressaltar que as condições de contorno das três simulações são as mesmas, alterando apenas o mecanismo de queima. As diferenças, portanto estão relacionadas com os diferentes produtos gerados na combustão dos ciclos anteriores (o ciclo mostrado aqui é o 4º ciclo da simulação), alterando a pressão final do gás que sai do cilindro, sua composição e a fração de gás residual do próximo ciclo. Além disso, é importante destacar que apesar das diferenças de fator lambda globalmente serem relativamente pequenas, localmente pode-se ter uma variação significativa da distribuição da mistura dentro do cilindro, conforme é analisado por VAZ, 2018. Na simulação com mecanismo de 115 espécies a distribuição de mistura é expressivamente diferente dos outros dois casos e, isso aliado com as particularidades do mecanismo, pode contribuir para que o núcleo de chama não se forme adequadamente após a ignição e a combustão ocorra de forma lenta, como observado na curva de taxa de liberação de calor.

Tabela 4.1 – Massa de ar aprisionada no cilindro e fator lambda global calculado para as três simulações, para o caso do experimento e da simulação 1D feita no GT-Power no trabalho de VAZ, 2018, para os combustíveis E10 e E22, rotação de 3000 rpm e 6 bar de BMEP.

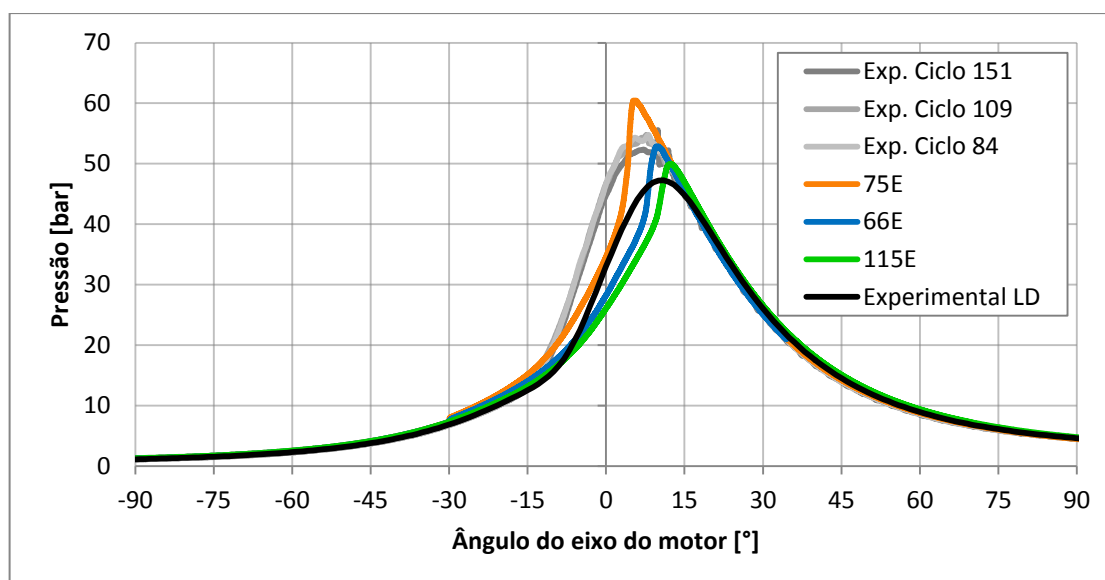
Combustível	E10				E22			
	MBT		Detonação		MBT		Detonação	
Variável	Ar (mg)	λ (global)	Ar (mg)	λ (global)	Ar (mg)	λ (global)	Ar (mg)	λ (global)
Experimental	301,4	1,00	299	0,98	303,3	1,00	305,6	1,00
GT-Power	-	-	-	-	299,7	0,98	309,6	1,02
CFD 66E	292,4	0,97	292,6	0,96	-	-	-	-
CFD 75E	291,87	0,97	293,1	0,96	297	0,98	315	1,03
CFD 115E	297,47	0,99	280,12	0,92	-	-	-	-

Fonte autor; dados da simulação 1D: VAZ, 2018

4.4.2 – Casos para com avanço de ignição para detonação forçada

Na Figura 4.15, são mostradas as curvas de pressão experimental média com o avanço de ignição condicionado para limite de detonação (LD), com avanço de $22,5^\circ$ antes do ponto morto superior, mostrada na curva preta do gráfico, e os três ciclos individuais do experimento que apresentaram traços de detonação com avanço de ignição de $25,0^\circ$ antes do ponto morto superior (curvas cinza) em conjunto com as curvas de pressão média no cilindro das simulações utilizando os mecanismos de 66, 75 e 115 espécies também condicionados para condição de detonação forçada.

Figura 4.15 – Curvas de pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do motor para os três mecanismo testados em conjunto com a curva de pressão medida experimentalmente para o caso com avanço para detonação forçada e limite de detonação (LD).

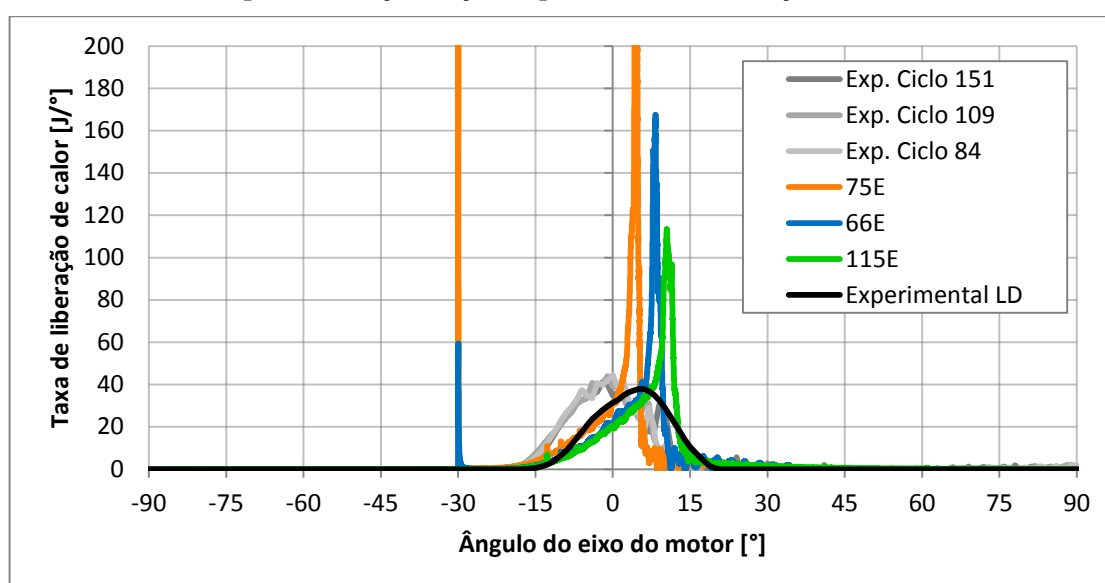


Fonte: autor

Comparando ainda as curvas de pressão média no cilindro das simulações com os mecanismos com a curva experimental (Figura 4.15), é possível perceber que para os mecanismos de 66 e 115 espécies a pressão média é menor que a pressão média experimental com avanço de LD. A curva de pressão da simulação com mecanismo de 75 espécies fica maior que a curva experimental de LD durante toda a combustão e, assim como os outros mecanismos, apresenta uma variação na taxa de aumento de pressão devido à rápida liberação de calor (que não acontece no teste experimental), evidenciada pelo segundo pico na taxa de liberação de calor, mostrada na Figura 4.16. A detonação calculada pelos mecanismos cinético-químicos ocorre de uma forma bem mais repentina e pontual do que é visto nas

curvas experimentais. Além disso, a curva de pressão no cilindro de nenhum dos mecanismos acompanhou o formato da curva de pressão dos ciclos individuais com detonação forçada. Nas curvas experimentais, a liberação de calor apresenta valores maiores do que é visto nas simulações no intervalo de -20° a 0° do eixo do motor. O mecanismo cujos resultados mais se aproximam das curvas experimentais é o de 75 espécies.

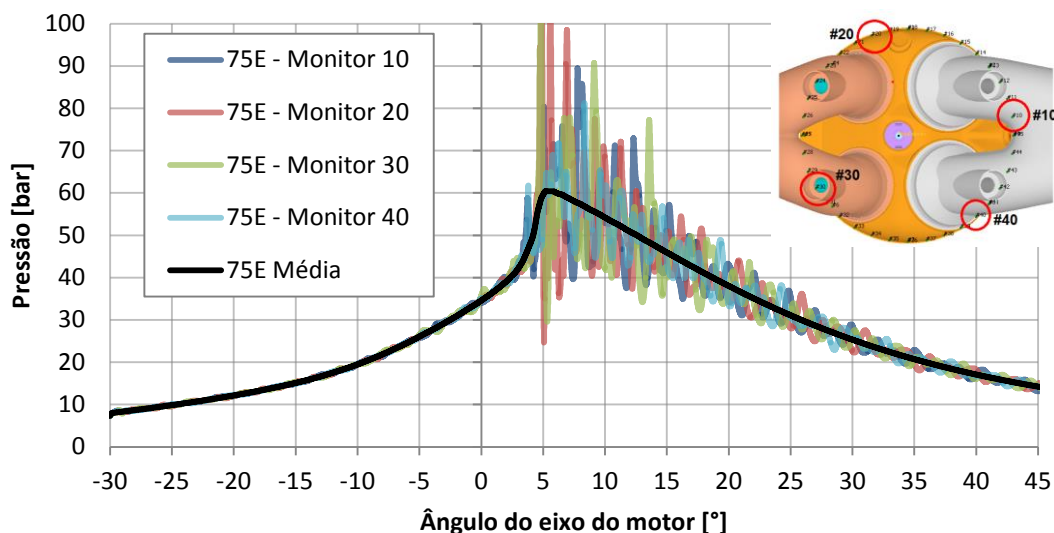
Figura 4.16 - Curvas de taxa de liberação de calor em função do ângulo do eixo do motor para os três mecanismo testados em conjunto com as curva calculada com o modelo quasidimensional e os dados experimentais para o caso de LD (condições médias de 200 ciclos) e para os ciclos individuais com avanço para detonação forçada e para limite de detonação (LD).



Fonte: autor

É possível notar que as curvas médias de pressão no cilindro das simulações não apresentam as oscilações de pressão vistas nos ciclos individuais experimentais, mesmo elas sendo correspondentes a apenas um ciclo só (quarto ciclo da simulação). Para verificar as flutuações de pressão no cilindro, utilizam-se os pontos de monitoramento que foram distribuídos ao longo do cilindro próximos à face do cabeçote. Na Figura 4.17 é mostrada a curva de pressão média no cilindro e as pressões registradas pelos pontos de monitoramento de número 10, 20, 30 e 40 para o caso da simulação com mecanismo de 75 espécies. Como as ondas de pressão variam fortemente com a posição no cilindro, ao fazer a média de pressão em todo o cilindro, as flutuações são mascaradas e não aparecem na curva de pressão média.

Figura 4.17 – Pressão média no cilindro e pressão nos pontos de monitoramento de número 10, 20, 30 e 40 para a simulação com mecanismo de 75 espécies e avanço de ignição condicionado para detonação forçada. As oscilações de pressão não são vistas na pressão média do cilindro, mas são evidentes nos pontos de monitoramento.



Fonte: autor

Novamente, analisando a Tabela 4.1 é possível perceber que a simulação com o mecanismo de 115 espécies apresentou uma massa de ar aprisionada no cilindro bem inferior à experimental e a massa de ar dos outros dois mecanismos, resultando em um fator lambda global bem mais rico que a condição estequiométrica. Além disso, as simulações com mecanismo de 66 espécies e 75 espécies já apresentam uma menor massa de ar do que no experimento (~2% menor), fato que pode estar prejudicando o desempenho dos mecanismos na velocidade de liberação de calor na combustão.

Na sequência dos resultados, são mostrados os índices indicadores de detonação MAPO e IMPO para o caso com avanço de ignição forçada das simulações com os mecanismos e dos três ciclos experimentais. Na Tabela 4.2, são mostrados: os indicadores de detonação calculados com as curvas de pressão obtidas em quatro pontos de monitoramento (10, 20, 30 e 40) para os três mecanismos cinético-químicos; o valor máximo dos indicadores de todos os pontos de monitoramento encontrados em cada simulação; e os valores calculados com as curvas experimentais dos três ciclos com detonação. Com base nas informações da Tabela 4.2, é possível perceber que os mecanismos de 66 e 75 espécies apresentam valores próximos de máxima amplitude de pressão e que dependendo do ponto de monitoramento hora um apresenta um valor maior, hora o outro. O mecanismo de 115 espécies apresenta amplitudes

máximas oscilações aproximadamente três vezes menores que os outros dois mecanismos, o que era de se esperar uma vez que ele apresentou menores picos de pressão no cilindro.

Tabela 4.2 – Máxima amplitude das oscilações de pressão filtrada (MAPO) em bar para quatro pontos de monitoramento e máximo no cilindro para as três simulações com os diferentes mecanismos cinético químicos, e para os três ciclos experimentais que apresentaram traços de detonação.

Índice de Detonação	MAPO (bar)					
	M10	M20	M30	M40	Máximo	Experimental
66E	16,9	36,2	27,5	19,1	36,2	Ciclo 151 1,6
75E	24,8	30,1	28,7	11,8	44,8	Ciclo 84 0,8
115E	8,6	10,7	10,4	6,0	14,5	Ciclo 109 0,8

Fonte: autor

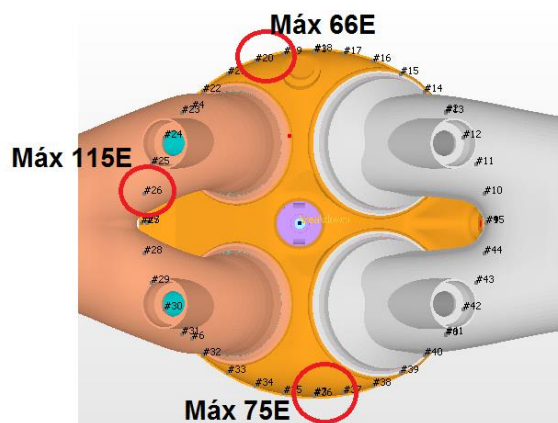
Tabela 4.3 – Integral das oscilações da curva de pressão filtrada e retificada (IMPO) em bar para quatro pontos de monitoramento e a máxima no cilindro para as três simulações com os diferentes mecanismos cinético químicos, e para os três ciclos experimentais que apresentaram traços de detonação.

Índice de Detonação	IMPO (bar)					
	M10	M20	M30	M40	Máximo	Experimental
66E	106,6	174,3	158,1	128,1	176,3	Ciclo 151 12,9
75E	160,4	163,1	185,9	113,9	189,0	Ciclo 84 9,4
115E	65,9	51,3	70,3	46,8	75,4	Ciclo 109 8,1

Fonte: autor

No modelo esquemático da Figura 4.18, são mostradas as posições dos pontos de monitoramento no cilindro em que cada mecanismo apresentou o valor máximo da máxima amplitude de oscilação da pressão filtrada.

Figura 4.18 – Posição no cilindro dos pontos de monitoramento os quais resultaram nos maiores valores de MAPO para cada mecanismo cinético químico testado.

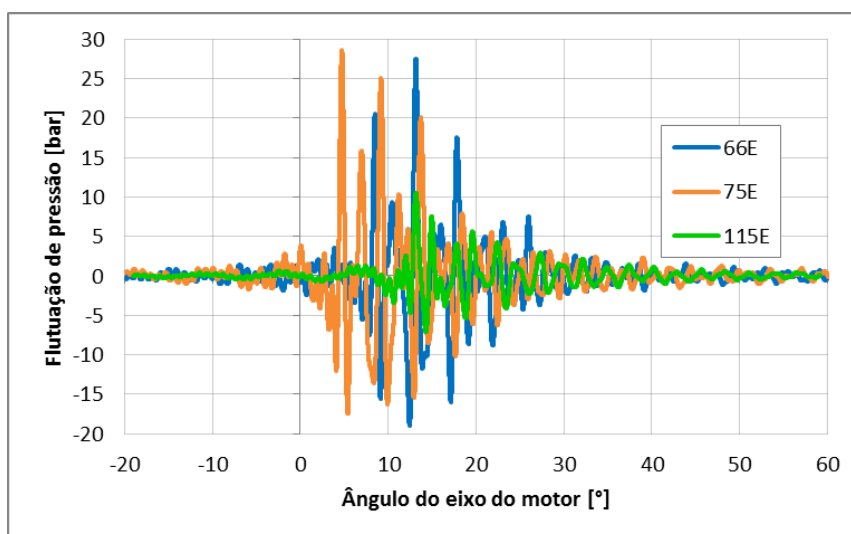


Fonte: autor

Analisando os valores máximos da amplitude das oscilações de pressão em cada mecanismo, é possível perceber que o mecanismo de 75 espécies apresenta o maior valor entre eles. Ao comparar os resultados das simulações com os calculados com as curvas de pressão experimental, percebe-se que são previstas pelos mecanismos avaliados flutuações de pressão cerca de vinte vezes o valor experimental. É preciso ressaltar que nas simulações a frequência de aquisição dos dados de pressão é bem menor do que no experimento: nas simulações, a pressão durante a detonação é adquirida num intervalo de $1,0 \times 10^{-8}$ segundos, enquanto nos dados experimentais o intervalo é de $5,0 \times 10^{-6}$ segundos, e assim algumas flutuações não são capturadas no experimento. Além disso, os pontos de monitoramento nas simulações foram colocados nas regiões com menores volumes formados na câmara de combustão, onde é mais provável de surgir de outras frentes de chama, e não na mesma posição que o sensor de pressão foi instalado no motor real, o que ajuda a aumentar as diferenças vistas entre os resultados experimentais e numéricos. Com base no critério adotado para caracterizar a presença de detonação nos ciclos (MAPO maior que 1,5 bar), é válido observar que apenas um ciclo experimental seria classificado efetivamente como detonante, uma vez que os outros dois apresentaram valores próximos de 0,8 bar, mesmo apresentando oscilações de pressão no ciclo.

Observando os valores da integral das oscilações de pressão, mostradas na Tabela 4.3, é possível perceber que o mecanismo 75E apresenta uma detonação com maior energia do que os outros mecanismos: 190 bar de IMPO contra 176 bar para o 66E e 75 bar para o 115E. Novamente, todos os mecanismos superestimam o valor experimental, que é de 12,9 bar. Além disso, na Figura 4.19, são mostradas as curvas de pressão filtradas calculadas no ponto de monitoramento de número 30 para os três mecanismos. Com base na Figura 4.19, é possível perceber que para o mesmo ponto de monitoramento o mecanismo cinético químico com 75 espécies apresenta oscilações maiores em um instante do ângulo do motor mais adiantado do que o mecanismo de 66 espécies, o que indica que esse mecanismo prevê um surgimento de detonação mais rápido que os outros.

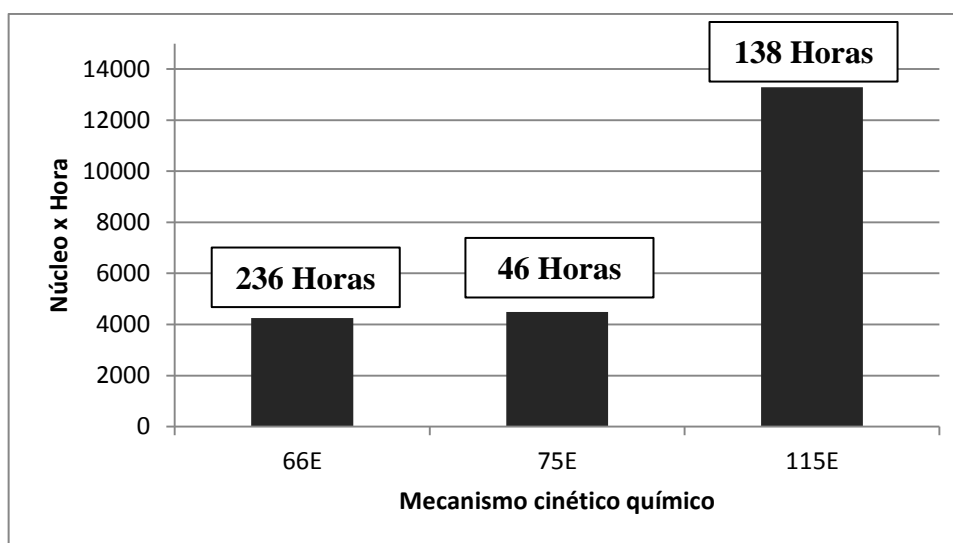
Figura 4.19 – Flutuações filtradas de pressão em função do ângulo do motor para os três mecanismos cinético químicos testados.



Fonte: autor

Na Figura 4.20, são mostrados os tempos de simulação de um ciclo completo com detonação para cada mecanismo cinético químico avaliado neste trabalho. Tanto o valor de tempo núcleo hora para efeito comparativo (quantidade de processadores utilizados em cada simulação vezes o tempo de simulação) é apresentado, uma vez que a simulação com mecanismo de 66 espécies foi realizada utilizando 18 processadores e as outras duas simulações utilizando 96 processadores, quanto o valor de tempo real em horas de cada simulação. É importante ressaltar que o esforço computacional é bastante elevado nesse tipo de simulação, como por exemplo, a simulação com o mecanismo cinético com menor número de espécies testado ter gastado 236 horas de simulação para completar um ciclo (quase dez dias de simulação). Além disso, é importante informar que não só o tempo computacional é elevado nesse tipo de simulação, mas também a quantidade de memória RAM do servidor que é requerida pelas simulações. Para exemplificar esse dado, uma simulação com um mecanismo de 75 espécies utilizando 18 processadores requer um total aproximado de 80 Gb de memória RAM, sendo que o total disponível em um dos servidores utilizado é de 126 Gb, ou seja, mesmo utilizando metade da quantidade total de processadores do servidor (total de 36) apenas uma simulação com esse mecanismo poderia ser realizada nesse servidor. Mecanismos maiores que 200 espécies químicas requerem por volta de 400 Gb de memória RAM, e, alguns mecanismos gerados por COTA, 2018 que não foram mostrados neste trabalho, mas foram testados em casos do motor só eram possíveis de simular no segundo tipo de servidor com limite de memória RAM de 512 Gb.

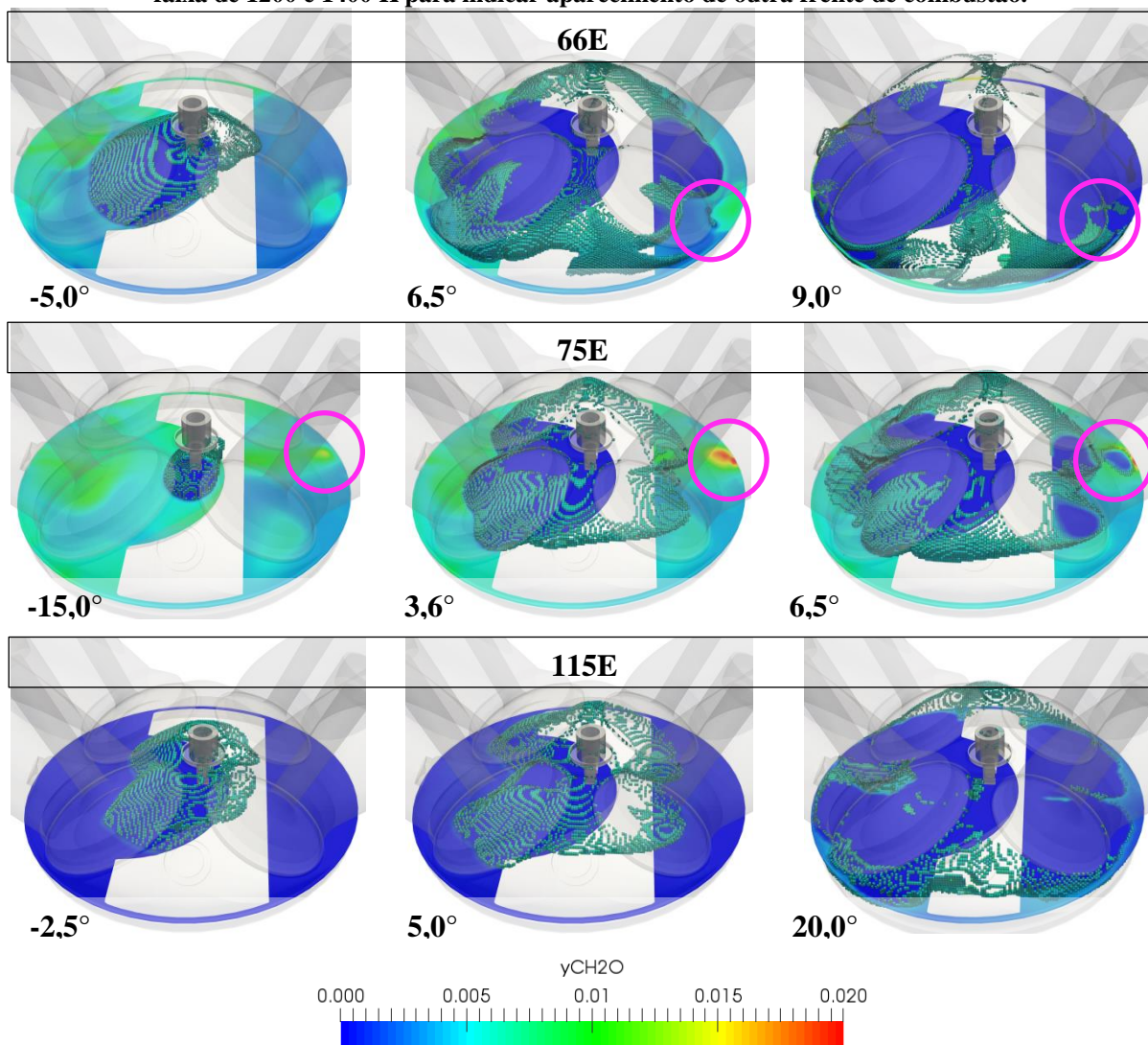
Figura 4.20 – Esforço computacional contabilizado pelo valor de número de processadores vezes o tempo de simulação em horas para simular um ciclo completo com detonação com os três mecanismos cinético químicos testados nesse trabalho, juntamente com o tempo total real para completar cada ciclo.



Fonte: autor

Na Figura 4.21, são mostradas as concentrações de CH_2O em um plano que corta o eixo do cilindro 1 mm abaixo da face do cabeçote do motor para três sequência de instantes do eixo motor para os mecanismos cinético químicos avaliados. Em conjunto com a concentração da espécie no plano, também é mostrada um iso-volume das células com temperatura entre 1200 e 1400 K para se ter uma referência espacial do progresso da chama no cilindro. Com base nas imagens do mecanismo de 66 espécies, é possível notar um aumento na concentração desse radical por volta do instante de -5° do eixo do motor no lado direito da figura (próximo às válvulas de exaustão do motor), é possível perceber também que no lado esquerdo do cilindro nas imagens existe uma região também com uma concentração maior do radical. Porém até o instante de $6,5^\circ$ do eixo do motor, nenhuma outra região com temperatura entre 1200 e 1400 é vista além da propagação da frente de chama ocasionada pela centelha. A partir desse instante, é possível perceber o surgimento de outra frente de chama somente na região próxima as válvulas (indicada pelo iso-volume de temperatura). Para o mecanismo de 75 espécies, a partir do tempo de -15° do eixo do motor é possível perceber também um aumento deste radical na região próxima a outra válvula de exaustão, e sua concentração é aumentada até o instante de $3,6^\circ$. Após esse instante, a concentração desse radical diminui e outra frente de chama aparece nessa região. Nas imagens do mecanismo com 115 espécies não foi possível identificar uma concentração relevante dessa espécie nem o surgimento de outra frente de chama em nenhum instante.

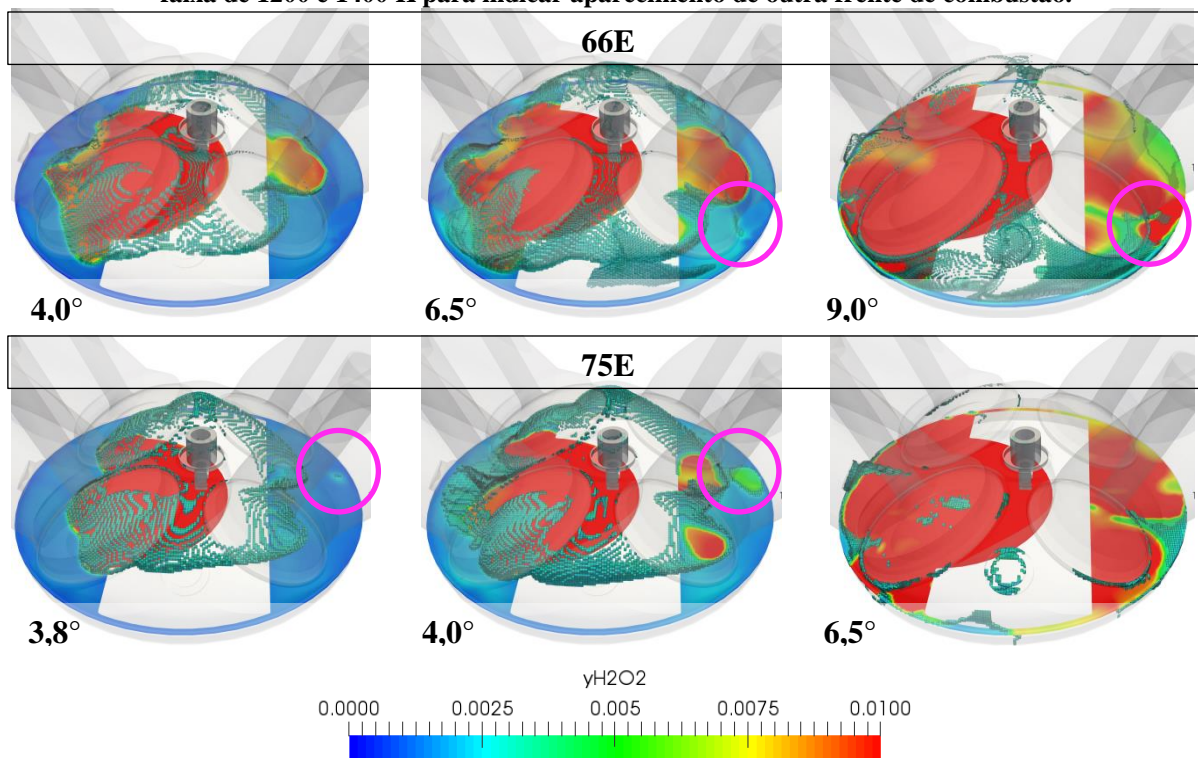
Figura 4.21 – Plano de concentração do radical CH_2O em conjunto com um iso-volume de temperatura na faixa de 1200 e 1400 K para indicar aparecimento de outra frente de combustão.



Fonte: autor

Análise similar é feita para a concentração da espécie H_2O_2 para os mecanismos de 66E e 75E na Figura 4.22. A diferença entre as espécies para indicar o surgimento de outra frente de chama é que a o H_2O_2 só aparece em quantidades relevantes fora da frente de chama principal, bem próximo ao instante que é visto outro iso-volume de temperatura no cilindro (6,5° para o mecanismo de 66E e em 4,0° para o de 75E). É válido ressaltar que para os dois mecanismos o surgimento de outra frente de chama ocorreu do lado direito do motor nas imagens, que é o lado das válvulas de exaustão, que seguido da vela de ignição é a fronteira com maior temperatura no domínio.

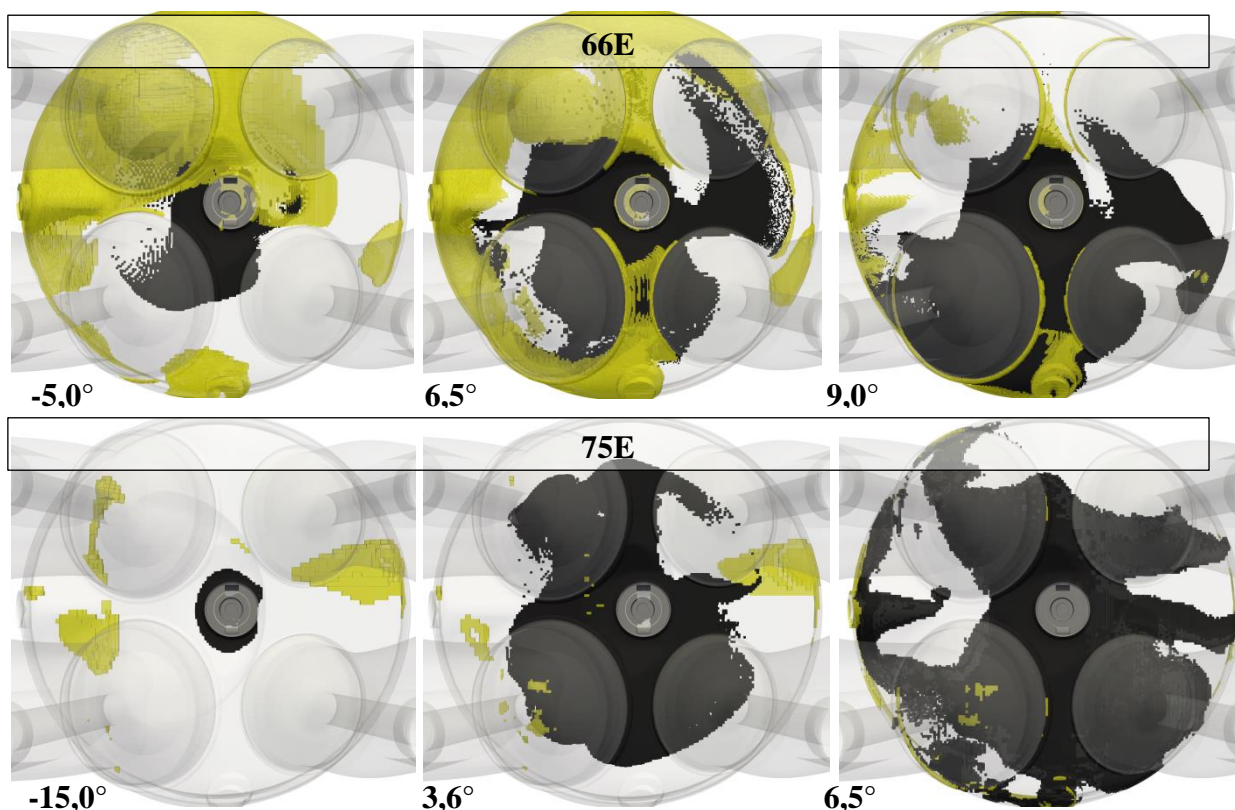
Figura 4.22 - Plano de concentração do radical H_2O_2 em conjunto com um iso-volume de temperatura na faixa de 1200 e 1400 K para indicar aparecimento de outra frente de combustão.



Fonte: autor

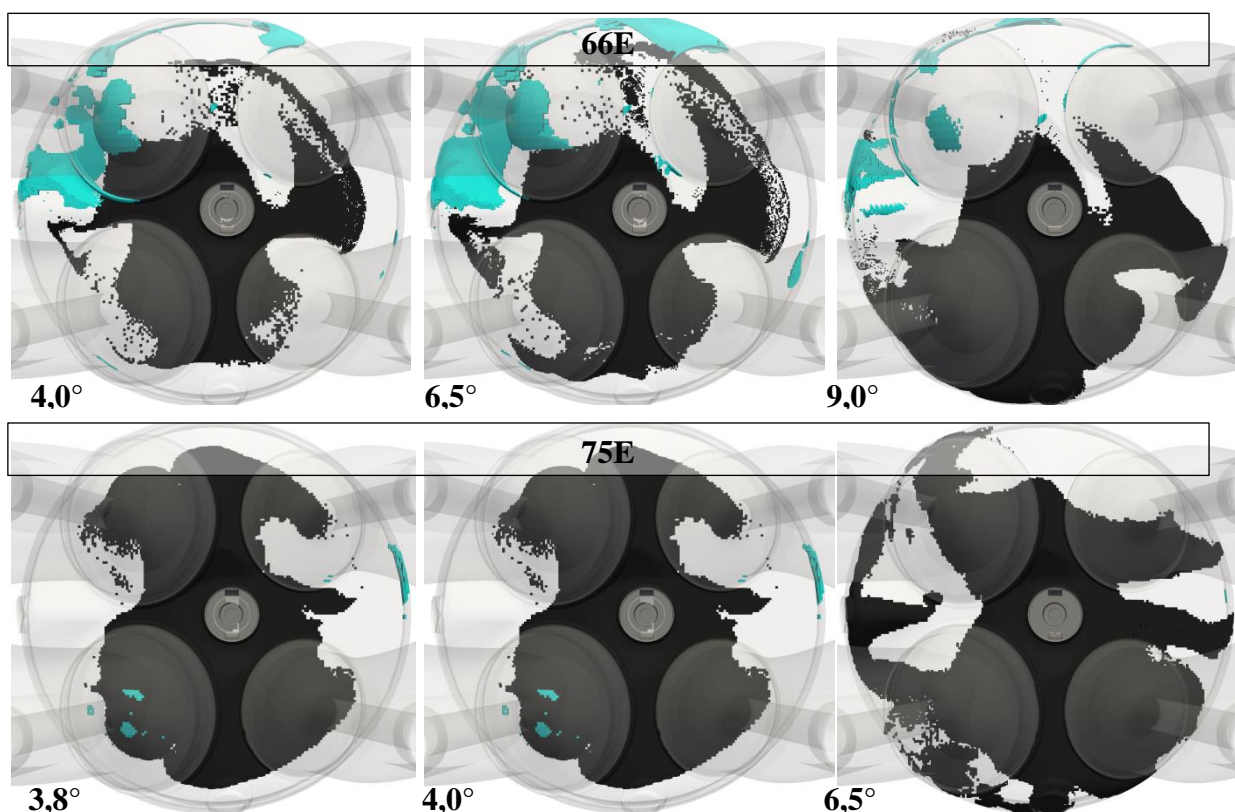
Para facilitar as análises das concentrações de radicais, os mesmos radicais são mostrados na Figura 4.23 e Figura 4.24, porém em forma de iso-volume nos mesmos instantes de tempo para os mecanismos 66E e 75E em conjunto com um iso-volume do radical OH para representar a frente de chama. Na Figura 4.23 é mostrado o radical CH_2O com concentração maior que 0,005 com a cor amarela e com a preta é o radical OH com concentração maior que 0,003. Na Figura 4.24 é mostrado o radical H_2O_2 também com concentração maior que 0,005 representado pelo iso-volume azul com o radical OH em preto.

Figura 4.23 – Iso-volume do radical CH_2O com concentração maior que 0,005 em cor amarela em conjunto com um iso-volume do radical OH maior que 0,003 para indicar frente de chama para os mecanismos de 66E e 75E.



Fonte: autor

Figura 4.24 - Iso-volume do radical H_2O_2 com concentração maior que 0,005 em cor amarela em conjunto com um iso-volume do radical OH maior que 0,003 para indicar frente de chama para os mecanismos de 66E e 75E.

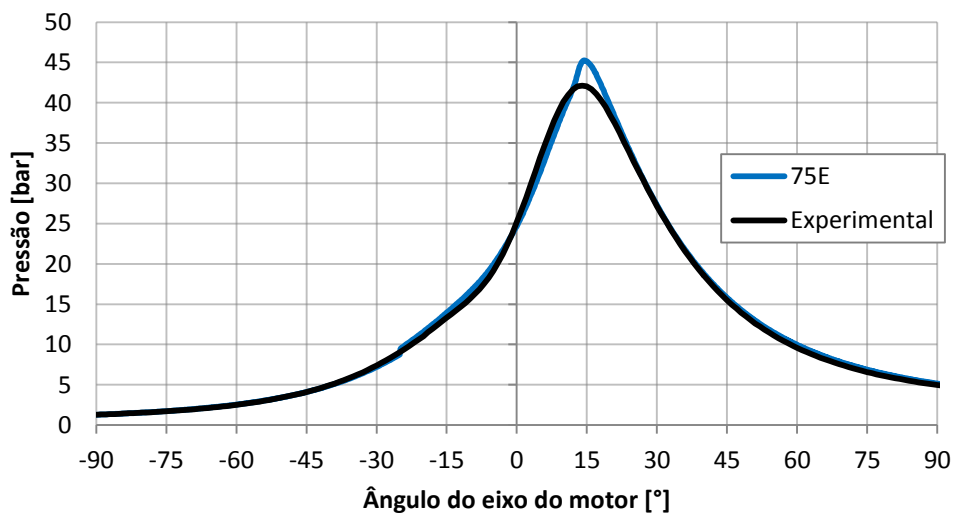


Fonte: autor

4.4.3 – Caso extrapolado de detonação com combustível E22

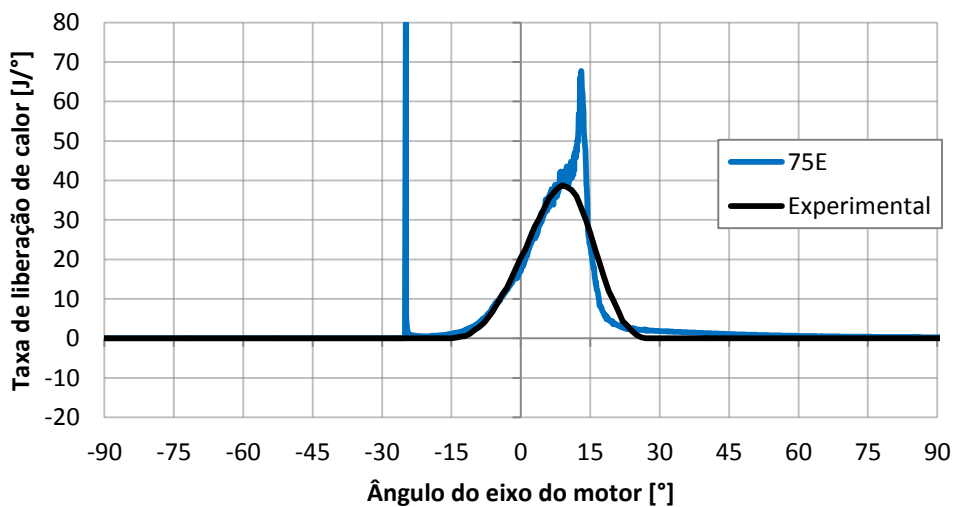
Na Figura 4.25 e na Figura 4.26 são mostradas respectivamente as curvas de pressão no cilindro e taxa de liberação de calor para a simulação utilizando o mecanismo cinético químico de 75 espécies e a média dos ciclos experimentais para o motor trabalhando com avanço de ignição para máximo torque de eixo.

Figura 4.25 – Curva de pressão no cilindro para o caso do motor operando com gasolina E22, 3000 rpm, 6 bar BMEP e avanço de ignição para MBT para a simulação com mecanismo de 75 espécies e a curva média experimental.



Fonte: autor

Figura 4.26 - Curva de taxa de liberação de calor para o caso do motor operando com gasolina E22, 3000 rpm, 6 bar BMEP e avanço de ignição para MBT para a simulação com mecanismo de 75 espécies e a curva média calculada com dados experimentais e modelo quase-dimensional.



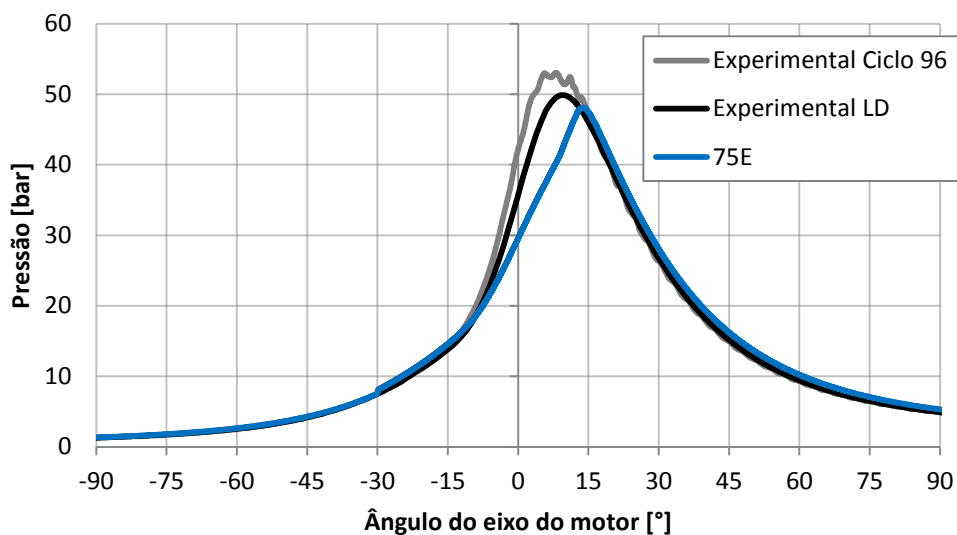
Fonte: autor

É interessante notar que para uma concentração maior de etanol, o mecanismo de 75 espécies apresenta resultados mais próximos dos dados experimentais (como pode ser verificado também no trabalho de VAZ, 2018 que utilizou o mesmo mecanismo para gasolina E50, E85 e etanol E100). Porém, novamente o mecanismo apresenta uma liberação de calor muito rápida e um pico bem acentuado por volta do instante de 8° do eixo do motor, que para o caso de MBT não existe no experimento. Esse resultado indica que o mecanismo parece mesmo estar um pouco mais reativo do que seria uma condição ideal e que as reações mais predominantes na oxidação da gasolina que parecem estar causando a maior diferença, uma vez que com maior porcentagem de etanol o mecanismo apresenta resultados melhores. Um método bastante utilizado para ajustar mecanismos cinéticos químicos para casos específicos é realizar o chama *tunning* do fator pré-exponencial na equação de Arrhenius, o que até então não foi feito nos mecanismos gerados por COTA, 2018. Mais detalhes desse procedimento estão descritos no trabalho de COTA, 2018 e não serão abordados aqui.

Novamente pela Tabela 4.2, apresentada na seção anterior, é possível perceber que a massa de ar aprisionada no cilindro está muito próxima da massa de ar calculada pela simulação unidimensional com programa GT-Power, que por sua vez está próxima do valor experimental. As simulações 3D têm os resultados de massa de ar comparados com as da simulação 1D pois as condições de contorno utilizadas nesse caso foram provenientes das simulações do trabalho de VAZ, 2018.

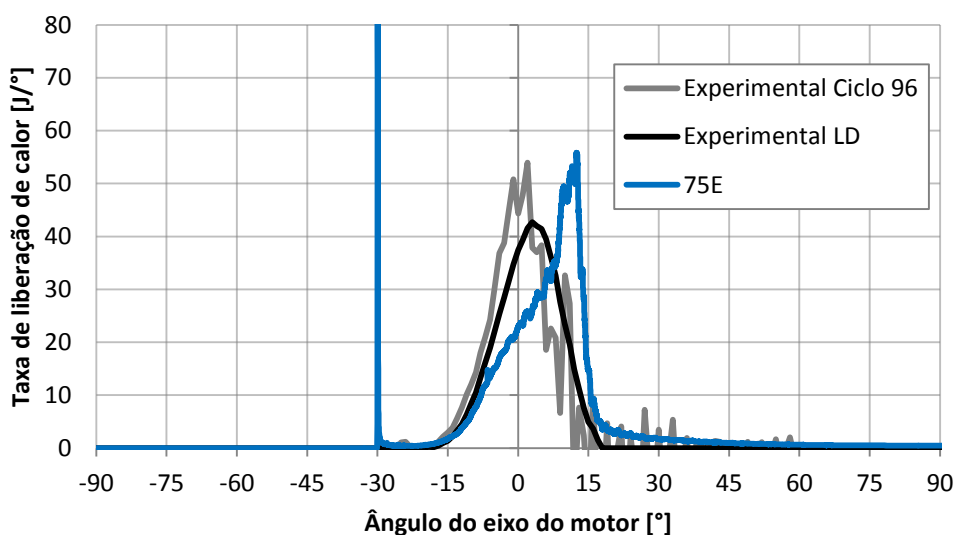
Na Figura 4.27 e na Figura 4.28 os resultados da simulação com mecanismo de 75 espécies e as curvas experimentais de um ciclo específico com detonação e média dos ciclos para o ponto de limite de detonação para o caso do motor com gasolina E22, 3000 rpm e 6 bar de BMEP. Com base na Figura 4.27 que mostra as curvas de pressão no cilindro é possível perceber que os picos de pressão experimentais são maiores do que o calculado pela simulação e eles também acontecem mais próximos do instante de 0° do motor (ponto morto superior) do que na simulação. Esse resultado também pode ser visto pela curva de taxa de liberação de calor, mostrada na Figura 4.28, na qual a liberação de calor da simulação ocorre mais lentamente que o previsto pelo modelo quasi-dimensional com os dados experimentais.

Figura 4.27 – Curvas de pressão no cilindro para o caso do motor operando com gasolina E22, 3000 rpm, 6 bar BMEP para a simulação com mecanismo de 75 espécies com avanço de ignição para a condição de limite de detonação e a curva média experimental assim como uma curva individual de um ciclo detonante desta condição.



Fonte: autor

Figura 4.28 - Curvas de taxa de liberação de calor para o caso do motor operando com gasolina E22, 3000 rpm, 6 bar BMEP para a simulação com mecanismo de 75 espécies com avanço de ignição para a condição de limite de detonação e a curva média, assim como uma curva individual experimental de um ciclo detonante desta condição calculadas com dados experimentais e modelo quase-dimensional.



Fonte: autor

Novamente foram calculados os índices de detonação para o ciclo individual com detonação e para três pontos de monitoração da simulação com mecanismo cinético químico de 75 espécies para o caso com avanço de ignição para limite de detonação com o motor operando com gasolina E22 e são mostrados na Tabela 4.4. Com base nos índices de detonação é possível perceber que para esse caso os valores de amplitude máxima das oscilações de pressão da curva filtrada (MAPO) foram bem mais condizentes com o valor experimental, embora ainda tenham sido maiores. Vale notar que o valor experimental para o ciclo calculado também é inferior ao critério para identificar detonação de 1,5 bar de MAPO. Os valores da integral das oscilações de pressão são quase duas vezes maiores que o indicado pelo cálculo experimental, mas estão muito mais próximos do que os resultados dos casos com gasolina E10 mostrados anteriormente, os quais apresentaram valores quase que vinte vezes maiores.

Tabela 4.4 – Índices de detonação para o ciclo individual com detonação e para três pontos de monitoração da simulação com mecanismo de 75 espécies para o caso com avanço de ignição para limite de detonação.

Caso: E22 - 3000 rpm - 6 bar BEMP				
Índice	Experimental	Monitor 35	Monitor 40	Monitor 15
MAPO	0,9	1,6	2,4	2,8
IMPO	14,7	20,6	27,8	25,1

Fonte: autor

4.4 – Considerações finais sobre os resultados

Com base em todos os resultados apresentados, desde a calibração e caracterização dos modelos relacionados ao spray até o objetivo final deste trabalho, que é a caracterização dos modelos quanto à predição de detonação, pode-se realizar algumas observações. A calibração do modelo de quebra secundária de gotas foi feita com base nas simulações de spray em bancada e validada com base em imagens qualitativas do spray, curva de penetração de líquido e com os resultados qualitativos da simulação 3D em motor com o mecanismo de Rohl para etanol. Apesar da metodologia de calibração do spray ter sido realizada de forma criteriosa, para uma maior confiabilidade dos resultados da modelagem da injeção combustível dever-se-ia ter informações experimentais de diâmetro de gota e campos de velocidade do spray. Mais adiante, as constantes de difusividade mássica para cálculo da difusividade do vapor de combustível de uma gota de combustível multicomponente

mostraram-se variáveis importantes que alteram de forma significativa a distribuição de mistura no cilindro, como é mostrado por MORAES, 2018. Além disso, o modelo de interação de gotas com as paredes também altera os resultados da combustão de forma significativa. Mais adiante, existe o desafio de elaborar um mecanismo para queima integrada de misturas de gasolina e etanol em diferentes proporções que respondam satisfatoriamente tanto com resultados de velocidade de chama laminar e atraso de ignição, quanto nos resultados gerais de combustão em motores de combustão interna, na predição de detonação e predição de gases poluentes (não foi encontrado trabalhos com esse caráter na literatura). Por fim, existe a limitação de hardware, que não permitiu utilizar uma malha um nível mais refinada ou testar mais mecanismos cinéticos químicos no intervalo de tempo ou mecanismos maiores e mais completos. Apesar de todas as limitações e desafios os trabalhos apresentados por COTA, 2018, VAZ, 2018, MORAES, 2018 e o presente trabalho, juntos apresentam uma metodologia extensa e robusta para elaboração e verificação de mecanismos cinético químicos em motores de combustão interna.

5 - CONCLUSÕES

As principais conclusões sobre a metodologia, os resultados e as discussões apresentadas neste trabalho podem ser listadas de forma sucinta em forma de tópicos nesta seção. Para alcançar o objetivo principal do trabalho foi feita uma série de etapas para aumentar a confiabilidade dos resultados:

- Foi feita uma calibração e validação das constantes de quebra secundárias de gotas do modelo híbrido KH-RT. A configuração final das constantes do modelo que apresentou diferença percentual da penetração de líquido do spray menor que 4% e boa correlação qualitativa com o spray experimental foi $B1=7,0$, $C3=0,5$ e $Cb=0$.
- Ao ser aplicado em uma simulação 3D do motor monocilindro utilizando um mecanismo cinético químico de referência para oxidação do etanol, o modelo de spray, assim como a modelagem do motor como um todo apresentou excelentes resultados.
- O modelo de interação das gotas com as paredes mostrou ter uma relevante importância nos resultados de combustão das simulações, sendo que o modelo que apresentou melhores resultados foi o de O' Rourke.
- Três mecanismos cinéticos químicos para queima de misturas de etanol e gasolina foram testados em condições sem detonação do motor (avanço de ignição para máximo torque de eixo) e condições de detonação com gasolina E10 como combustível: um mecanismo da literatura com 66 espécies (ABIANEH , 2015 e dois desenvolvidos por COTA, 2018, um com 75 espécies e outro com 115 espécies.
- Nenhum dos modelos testados conseguiu não apresentar sinais de detonação para o caso de MBT, sendo que os mecanismos de 66E e 75E apresentaram resultados semelhantes, mas com picos de pressão e de taxa de liberação de calor maiores que os experimentais. O mecanismo de 115 espécies não conseguiu uma combustão suficientemente rápida e apresentou um baixo valor de pico de pressão.
- No caso de detonação nenhum dos modelos apresentou curvas de pressão no cilindro suficientemente elevadas como foi observado nos ciclos individuais experimentais com detonação. O modelo de 75 espécies, porém mais se aproximou a curva de pressão média da condição de limite de detonação.

- Em relação aos índices de detonação no caso com gasolina E10, os modelos de 66 e 75 espécies apresentaram valores significativamente maiores que os experimentais (cerca de vinte vezes), sendo que o último modelo apresentou ligeiramente maiores índices. O modelo de 115 espécies apresentou valores de indicadores de detonação duas vezes menores que os outros dois modelos.
- Em relação ao caso com gasolina E22, o modelo de 75 espécies apresentou resultados bem melhores que com gasolina E10, indicando que o mecanismo responde melhor para maiores frações de etanol na gasolina.
- Os índices de detonação da simulação de limite de detonação com mecanismo de 75 espécies e combustível E22 foram muito mais coerentes com os valores calculados experimentalmente.
- Por fim, o trabalho apresenta uma metodologia para realizar simulações 3D de injeção direta de combustível, com misturas de gasolina e etanol, e utilizando mecanismos cinéticos químicos para oxidação de combustível em casos com presença de detonação.

6 - SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Para continuação deste trabalho, ficam as sugestões para trabalhos futuros:

- Validar o modelo de quebra de gotas quanto ao diâmetro das gotas e campo de velocidades próximos aos jatos do spray.
- Realizar comparações de simulações 3D de injeção direta de combustível com experimentos utilizando a camisa de quartzo do motor monocilindro para verificar a formação e evaporação de filme líquido e avaliar melhor os modelos numéricos.
- Realizar análises nos mesmos mecanismos de COTA, 2018, mas após a calibração das constantes das reações químicas
- Realizar testes dos mecanismos para condição de injeção indireta de combustível, para a formação de uma carga mais homogênea no cilindro.
- Testar outros mecanismos com maior número de reações e espécies para predição de detonação.
- Comparar resultados das simulações com resultados obtidos com o sensor visioknock para validar o instante e o posicionamento do surgimento de outras frentes de chama.

7 - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABIANEH, O. S. Development of a New Skeletal Chemical Kinetic Mechanism for Ethanol Reference Fuel. **Journal of Engineering for Gas Turbines and Power**, 137(6), 2015.

AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS (ANP). **Panorama do Abastecimento de Combustíveis**. 2017. Disponível em: <http://www.anp.gov.br/wwwanp/images/publicacoes/livros_e_revistas/Panorama_do_Abastecimento2017.pdf>. Acesso em: 24/01/2018.

ANDRAE, J. C.; BRINCK, T.; KALGHATGI, G. T. HCCI experiments with toluene reference fuels modeled by a semidetailed chemical kinetic model. **Combustion and Flame**, v. 155, n. 4, p. 696-712, 2008.

AMSDEN, A. A., O'ROURKE, P.J., E BUTLER, T.D. **KIVA-II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays**. Los Alamos National Laboratory Technical Report LA-11560-MS, 1989.

BAÊTA, J. G. C. **Metodologia experimental para a maximização do desempenho de um motor multcombustível turboalimentado sem prejuízo à eficiência energética global**. 2006. 263 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)-Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2006.

BAÊTA, J. G. C.; SILVA, T. R.; NETTO, N. A.; MALAQUIAS, A. C.; RODRIGUES FILHO, F. A.; PONTOPPIDAN, M. Full spark authority in a highly boosted ethanol DISI prototype engine. **Applied Thermal Engineering**, v. 139, p. 35-46, 2018.

BAÊTA, J. G. C.; PONTOPPIDAN, M.; SILVA, T. R.. Exploring the limits of a down-sized ethanol direct injection spark ignited engine in different configurations in order to replace high-displacement gasoline engines. **Energy conversion and management**, v. 105, p., 2015.

BARROS, J. E. M. **Estudo de motores de combustão interna aplicando análise orientada a objetos**. 2003. 205 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)-Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2003.

BATTISTONI, M.; GRIMALDI, C. N.; CRUCCOLINI, V.; DISCEPOLI, G.; DE CESARE, M. Assessment of Port Water Injection Strategies to Control Knock in a GDI Engine through Multi-Cycle CFD Simulations (No. 2017-24-0034). **SAE Technical Paper**, 2017.

BATTISTONI, M.; MARIANI, F.; RISI, F.; POGGIANI, C. Combustion CFD modeling of a spark ignited optical access engine fueled with gasoline and ethanol. **Energy Procedia**, v. 82, p. 424-431, 2015.

BÄUERLE, B.; HOFFMANN, F.; BEHRENDT, F.; WARNATZ, J. Detection of hot spots in the end gas of an internal combustion engine using two-dimensional LIF of formaldehyde. p. 135-141. **25th Symposium (International) on Combustion**, 1994.

BAUMGARTEN, C. **Mixture Formation in Internal Combustion Engine**. Springer-Verlag: Berlin Heidelberg, f. 294. 2006.

BRAGA, R. M.; REIS, L. M.; FONSECA, L. G.; VALLE, R. M.; HUEBNER R. Metodologia De Análise De Sensibilidade Dos Resultados Ao Refino De Malha Em Motores De Combustão Interna. **International Congress of Engines, Fuel and Combustion**, 2017.

BRAGA, R., VAZ, M.; MARTINS, C. M.; HINDI, G.; HUEBNER, R. 3D Numerical Characterization of a Multi-Holes Injector in a Quiescent Vessel and Its Application in a Single-Cylinder Research Engine Using Ethanol. **SAE Technical Paper** 2017-36-0360, 2017.

BRECQ, G.; LE CORRE, O. Modeling of in-cylinder pressure oscillations under knocking conditions: introduction to pressure envelope curve. **SAE Technical Paper**, 2005.

BURMAN, P. G.; DELUCA, F. **Fuel injection and controls for internal combustion engines**. Simmons-Boardman, 1962.

CAVINA, N.; CORTI, E.; MINELLI, G.; MORO, D.; SOLIERI, L. Knock indexes normalization methodologies. **SAE Technical Paper**, 2006.

CHIODI, M. **An innovative 3D-CFD-approach towards virtual development of internal combustion engines**. ed.: Vieweg, Teubner, 2011.

COTA, F.S. **Desenvolvimento de mecanismos cinéticos químicos para diferentes misturas de gasolina e etanol**. 2018. Dissertação (Mestrado em Engenharia mecânica)-Universidade Federal de Minas Gerais. Belo Horizonte, 2018.

DÖHLER, A.; PRITZE, S. **A contribution to better understanding the pre-ignition phenomenon in highly charged internal combustion engines with direct fuel injection.** In: 4th International Conference on Knocking in Gasoline Engines (Berlin). p. 41-61, 2013.

DSPORT. **ENGINE 101 Part 2:** The truth about how your engine really works. Disponível em: < <http://dsportmag.com/the-tech/engine-101-part-2-the-truth-about-how-your-engine-really-works-2/> >. Acesso em: 03/06/2018.

EMPRESA DE PESQUISA EM ENERGIA (EPE). **Plano Decenal de Expansão de Energia 2026.** 2017. Disponível em: <http://antigo.epe.gov.br/PDE/Documents/Arquivos/PDE2026/PDE2026_versao_para_ConsultaPublica.pdf>. Acesso em: 06/01/2018.

ENERGY INTERNATIONAL AGENCY (EIA). **FAQ.** 2017. Disponível em: <<https://www.eia.gov/tools/faqs/faq.php?id=427&t=3>>. Acesso em: 06/01/2018.

ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (EPA). **Inventory of U.S. Greenhouse Gas Emissions and Sinks: 1900-2015.** 2017. Disponível em https://www.epa.gov/sites/production/files/2017-02/documents/2017_complete_report.pdf>. Acesso em: 05/01/2018.

ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (EPA). **Inventory of U.S. Greenhouse Gas Emissions and Sinks: 1900-2015.** 2015. Disponível em: <<https://www.epa.gov/ghgemissions/overview-greenhouse-gases>>. Acesso em 05/01/2018.

ERICSSON, P.; ANDREAS S. Characterization of Particulate Emissions Propagating in the Exhaust Line for Spark Ignited Engines. **SAE Technical Paper.** no. 2009-01-2654. 2009.

FERGUSON, C. R.; KIRKPATRICK, A. T. **Internal Combustion Engines:** Applied Thermosciences. 2 ed. New York: John Wiley & Sons, Inc. 2001.

FREELAND, P.; WARTH, M.; MAHR, B. **Minimising autoignition for optimum efficiency in high specific output spark ignited engines.** In: 4th Conf on Knocking in Gasoline Engine, Berlin. 2013.

GANESAN, V. **Internal combustion engines.** 2 ed. New York: McGraw Hill Inc., 1995.

GIACOSA, D. **Motori Endotermici.** Barcelona: Omega, 1988.

GIVLER, S. D.; RAJU, M.; POMRANING, E.; SENEAL, P. K.; SALMAN, N.; REESE, R. Gasoline combustion modeling of direct and port-fuel injected engines using a reduced chemical mechanism (No. 2013-01-1098). **SAE Technical Paper**, 2013.

GLASSMAN, I.; YETTER, R. A. **Combustion**. 4 ed. New York: Academic Press, 2008.

GÜNTHER, Michael; SENS, Marc (Ed.). **Knocking in Gasoline Engines: 5th International Conference**, December 12-13, 2017, Berlin, Germany. Springer, 2017.

GUZZO, M. E. **Metodologias para Análise e Caracterização dos Sprays de um Injetor de Injeção Direta de Gasolina**. 2012. 153 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)-Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2012.

HEYWOOD, John B. **Internal combustion engine fundamentals**. 1 ed. New York: McGraw-Hill, 1988.

HINDI, G. DE Q. **3D Numerical Investigation Of Mixture Formation And Combustion In A DISI Engine At Part-Load Under Stratified Operation**. 2011. 174 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica)-Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 2011.

HINDI, G. DE Q. **Numerical analysis of mixture formation in fuel sprays using advanced turbulence modeling**. 2018. 167 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)-Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2018.

INCROPERA, Frank P.; DEWITT, David P.; BERGMAN, Theodore L. **Fundamentos de Transferência de Calor E de Massa**. Grupo Gen-LTC, 2000.

JAASIM, M.; HERNANDEZ PEREZ, F.; VEDHARAJ, S.; VALLINAYAGAM, R.; DIBBLE, R. W.; IM, H. G. Effect of Timing and Location of Hotspot on Super Knock during Pre-ignition. **SAE Technical Paper Series**, 2017.

JERZEMBECK, S.; PETERS, N.; PEPIOT-DESJARDINS, P.; PITSCH, H. Laminar burning velocities at high pressure for primary reference fuels and gasoline: Experimental and numerical investigation. **Combustion and Flame**, 156(2), 292-301, 2009.

JIA, M.; XIE, M. A chemical kinetics model of iso-octane oxidation for HCCI engines. **Fuel**, 85(17-18), 2593-2604, 2006.

KRUPA, S. V. **Global Climate Change: Processes and Products-An Overview.**

Environmental Monitoring and Assessment, 46:73–88. 1997.

LEE, C. S.; SUNG W. P. An experimental and numerical study on fuel atomization characteristics of high-pressure diesel injection sprays. **Fuel.** 81.18 .2002.

LIU Y.D.; JIA M; XIE M.Z.; PANG B. Enhancement on a skeletal kinetic model for primary reference fuel oxidation by using a semidecoupling methodology. **Energy & Fuel**; 26:7069–83, 2016.

LIU, Y.; JIA, M.; XIE, M.; PANG, B. Improvement on a skeletal chemical kinetic model of iso-octane for internal combustion engine by using a practical methodology. **Fuel**, 103, 884–891, 2013.

LIU, Y.; MING JIA, MAO-ZHAO X.; BIN P. Enhancement on a skeletal kinetic model for primary reference fuel oxidation by using a semidecoupling methodology. **Energy & Fuels** 26, no. 12 (2012): 7069-7083.

MACHADO, G. B. **Metodologias para Desenvolvimento de combustíveis e determinação da velocidade de propagação de chama em motores de ignição por centelha.** 2012. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica)-PUC-Rio, Rio de Janeiro, 2012.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional.** Livros Técnicos e Científicos Editora: Rio de Janeiro, 2010.

MARINOV, N. M. A detailed chemical kinetic model for high temperature ethanol oxidation. **International Journal of Chemical Kinetics.** v. 31, n. 3, p. 183-220, 1998.

MARTINS, C.M. **Avaliação de mecanismo cinético químico reduzido na predição de emissão de poluentes específicos por motores de combustão interna para misturas de gasolina e etanol.** 2018. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica)-Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2018.

MASSACHUSETTS INSTITUTE OF TECHNOLOGY (MIT) Report. **On the Road toward 2050 - Potential for Substantial Reductions in Light-Duty Vehicle Energy Use and Greenhouse Gas Emissions.** 2016. Disponível em: <<http://web.mit.edu/sloan-auto-lab/research/beforeh2/files/On-the-Road-toward-2050.pdf>>. Acesso em: 08/01/2018.

MEDINA, A., CURTO-RISSO, P. L., HERNÁNDEZ, A. C., GUZMÁN-VARGAS, L., ANGULO-BROWN, F., SEN, A. K. **Quasi-dimensional simulation of spark ignition engines**. London: Springer, 2014.

MEHL M.; PITZ, W.J.; WESTBROOK, C. K.; CURRAN, H. J. Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions. **Proceedings of the Combustion Institute**. Volume 33, Issue 1,193-200, 2011.

MITTAL, A.; WIJEYAKULASURIYA, S. D.; PROBST, D.; BANERJEE, S.; FINNEY, C. E.; EDWARDS, K. D.; NABER, C. Multi-Dimensional Computational Combustion of Highly Dilute, Premixed Spark-Ignited Opposed-Piston Gasoline Engine Using Direct Chemistry With a New Primary Reference Fuel Mechanism. In: **ASME 2017 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference**. American Society of Mechanical Engineers, 2017. p. V002T06A022-V002T06A022.

NATIONAL AERONAUTICS AND SPACE ADMINISTRATION (NASA). **Greenhouse Gases: Refining the Role of Carbon Dioxide**. 1998. Disponível em: <https://www.giss.nasa.gov/research/briefs/ma_01/>. Acesso em: 05/01/2018.

O'ROURKE, P. J.; AMSDEN, A. A. A Spray/Wall Interaction Submodel for the KIVA-3 Wall Film Model. **SAE Technical Paper** 2000-01-0271, 2000.

ORGANIZAÇÃO INTERNACIONAL DOS PRODUTORES DE VEÍCULOS AUTOMOTIVOS (OICA). **Motorization Rate 2015 – Worldwide**. Disponível em: <http://www.oica.net/category/vehicles-in-use/>. Acesso em: 05/01/2018.

PAL, P.; WU, Y.; LU, T.; SOM, S.; SEE, Y. C.; LE MOINE, A. Multi-Dimensional CFD Simulations of Knocking Combustion in a CFR Engine. In **ASME 2017 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference** (pp. V002T06A017-V002T06A017). American Society of Mechanical Engineers, 2017.

PAN, J.; WEI, H.; SHU, G.; PAN, M.; FENG, D.; LI, N. LES analysis for auto-ignition induced abnormal combustion based on a downsized SI engine. **Applied energy**, 191, 183-192, 2017.

PARK, S.; FURUKAWA, T. Validation of Turbulent Combustion and Knocking Simulation in Spark-Ignition Engines Using Reduced Chemical Kinetics (No. 2015-01-0750). **SAE Technical Paper**, 2015.

PATTERSON, M. A.; REITZ, R. D. Modelling the Effect of Fuel Spray Characteristics on Diesel Engine Combustion and Emission. **SAE Technical Paper** 980131.1998.

PERINI, F.; REITZ, R. D. Improved atomization, collision and sub-grid scale momentum coupling models for transient vaporizing engine sprays. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 79, p. 107-123, 2016.

POMRANING, E.; WANG, M. **Advanced CONVERGE Training: Advanced Combustion Overview and SAGE**. Convergent Science, Wisconsin, 2016.

PULKRABEK, W. W. **Engineering fundamentals of the internal combustion engine**. Prentice Hall: New Jersey, 1997.

QIAO, Q., ZHAO, F., LIU, Z., JIANG, S., & HAO, H. Comparative Study on Life Cycle CO₂ Emissions from the Production of Electric and Conventional Vehicles in China. **Energy Procedia**, v. 105, p. 3584-3595, 2017.

RANZI, E.; FRASSOLDATI, A.; GRANA, R.; CUOCI, A.; FARAVELLI, T.; KELLEY, A. P.; LAW, C. K. Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 38, n. 4, p. 468-501, 2012.

REIF, KONRAD. **Gasoline Engine Management**. Friedrichshafen: Springer Vieweg, 2015.

REIS, L. M. **Análise Numérica Do Spray De Etanol Em Câmara Atmosférica**. 2015. 130 f. Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado em Engenharia Mecânica)-Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2015.

REITZ, R. D.; DIWAKAR, R. Structure of High-Pressure Fuel Sprays. **SAE Technical Paper**. 870598, 1987.

REITZ, R.D. e BRACCO, F.V. **Mechanisms of Breakup of Round Liquid Jets**. Encyclopedia of Fluid Mechanics, Gulf Publishing Company, 1986.

RICHARDS, K. J.; SENEAL, P. K.; POMRANING, E. **CONVERGE 2.4 Manual**, Convergent Science, Inc., Madison, WI 2017.

ROBERT, A.; RICHARD, S.; COLIN, O.; POINSOT, T. LES study of deflagration to detonation mechanisms in a downsized spark ignition engine. **Combustion and Flame**, 162(7), 2788-2807, 2015.

ROTTENGRUBER, H.; TODSEN, E. C. **Potentials and limits of downsizing**. In: 4 th International Conference on Knocking in Gasoline Engines, Berlin. 2013.

SCHMIDT, D.P.; RUTLAND, C. J. A New Droplet Collision Algorithm. **Journal of Computational Physics**, v. 164 (1), p. 62-80, 2000.

SENEAL, P. K.; POMRANING, E.; RICHARDS, K. J.; SOM, S. Grid-convergent spray models for internal combustion engine CFD simulations. In: **ASME 2012 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference**. American Society of Mechanical Engineers. p. 697-710, 2012.

SENEAL, P.K. **Development of a Methodology for Internal Combustion Engine Design Using Multi-Dimensional Modeling with Validation Through Experiments**. Ph.D. Thesis, University of Wisconsin-Madison, Madison, WI, 2000.

SUZUKI, R. SHOJI, H. YOSHIDA, K. IJIMA, A. Analysis of knocking in an SI engine based on in-cylinder: spectroscopic measurements and visualization. **SAE Technical Paper** 2010-32-0092, 2010.

TAN, J. Y.; BONATESTA, F.; NG, H. K.; GAN, S. Developments in computational fluid dynamics modeling of gasoline direct injection engine combustion and soot emission with chemical kinetic modeling. **Applied Thermal Engineering**. v.107, p. 936-959. 2016.

TAYLOR, C. F. **Análise dos motores de combustão interna**. Vol. 1 E. Blucher, 1988.

TAYLOR, C. F. **Análise dos motores de combustão interna**. Vol. 2 E. Blucher, 1988.

TEIXEIRA, A. F. **Modelo Matemático para Diagnóstico em Tempo Real da Combustão nos Motores de Combustão Interna de Ignição por Centelha**. 2015. 110 f. Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado em Engenharia Mecânica)-Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais – CEFET MG, Belo Horizonte, 2015.

TSURUSHIMA, T. A new skeletal PRF kinetic model for HCCI combustion. **Proceedings of the Combustion Institute**, 32(2), 2835-2841, 2009.

URNS, S. R. **An introduction to combustion**. 3 ed. New York: McGraw-hill, 2013.

VAZ, M. G. **Validação de mecanismos cinéticos químicos reduzidos para mistura de gasolina-etanol em um motor de combustão interna**. 2018. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica)-Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2018.

VERSTEEG, H., K.; MALALASEKERA, W. **Introduction to Computational Fluid Dynamics. Science**. 2 ed. Harlow: Pearson Education Limited, Vol. 44, 2005.

WANG, Z.; LIU, H.; SONG, T.; QI, Y.; HE, X.; SHUAI, S.; WANG, J. Relationship between super-knock and pre-ignition. **International Journal of Engine Research**, v. 16, n. 2, p. 166-180, 2015.

WANG, Zhi; WANG, Yue; REITZ, Rolf D. Pressure oscillation and chemical kinetics coupling during knock processes in gasoline engine combustion. **Energy & fuels**, v. 26, n. 12, p. 7107-7119, 2012.

WANG, Z.; LIU, H.; REITZ, R. D. Knocking combustion in spark-ignition engines. **Progress in Energy and Combustion Science**, 61, 78-112, 2017.

WU, Y.; PAL, P.; SOM, S.; LU, T. A skeletal Chemical Kinetic Mechanism for Gasoline and Gasoline/Ethanol Blend Surrogates for Engine CFD Applications. **International Conference on Chemical Kinetics**, 2017.

YASUEDA, S.; TOZZI, L.; SOTIROPOULOU, E. Predicting autoignition caused by lubricating oil. **CIMAC Paper**, No.37, 2013.

YANG, S.; POMRANING, E.; JIA, M. Simulations of gasoline engine combustion and emissions using a chemical-kinetics-based turbulent premixed combustion modeling approach. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: **Journal of Automobile Engineering**, v. 231, n. 6, p. 743-765, 2017.

ZHAO, H. **Advanced direct injection combustion engine technologies and development: volume 1 gasoline and gas engines**. Great Abington, Cambridge, 2010.

ZHEN, X.; WANG, Y.; XU, S.; ZHU, Y.; TAO, C.; XU, T.; SONG, M. The engine knock analysis—An overview. **Applied Energy**, v. 92, p. 628-636, 2012.

ANEXO A – METODOLOGIA QUASIDIMENSIONAL PARA CÁLCULO DE TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR EXPERIMENTAL

A seguinte metodologia foi retirada de um relatório interno do Centro de Tecnologia da Mobilidade da UFMG contendo a metodologia de cálculo e os resultados das provas experimentais no motor monocilindro para o projeto de residência tecnologia para engenheiros.

Modelo termodinâmico de uma zona para avaliação do processo de combustão

A Figura A-1 apresenta o desenho do volume de controle para o modelo quase-dimensional da combustão.

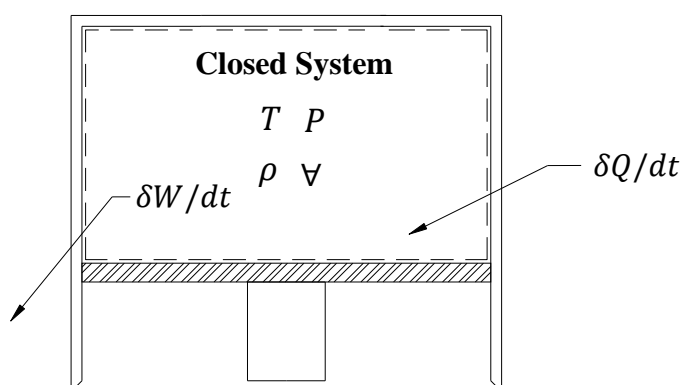


Figura A-1 – Desenho esquemático da modelagem matemática quase-dimensional

Aplicando o princípio de conservação da energia ao volume de controle da Figura A-1 (sistema fechado) tem-se que a taxa de liberação de calor pode ser escrita como:

$$\frac{\delta Q_a}{d\theta} = m \frac{c_v dT}{d\theta} + \frac{P dV}{d\theta}$$

no qual,

m , massa mistura dentro do cilindro

T , temperatura média do gás dentro do cilindro.

P , pressão média do gás dentro do cilindro.

V , volume instantâneo disponível no cilindro.

c_v , calor específico a volume constante da mistura no interior do cilindro (função da temperatura).

θ , posição angular do virabrequim (0° - PMS de compressão).

A temperatura média dentro do cilindro é dada pela equação do gás ideal:

$$T = \frac{P V}{m R}$$

no qual,

R , constante da mistura de gases (0,280 kJ/kg.K)

m , massa no interior do cilindro, estimada pela equação do gás ideal a -180° CA

O calor específico a volume constante da mistura no interior do cilindro é uma função da temperatura e é dado por:

$$c_v = 0,7 + 0,255 \frac{T}{1000} \quad [kJ/kg.K]$$

Resolvendo para uma curva de pressão medida, tem-se a taxa de liberação de calor mostrada na Figura A-2.

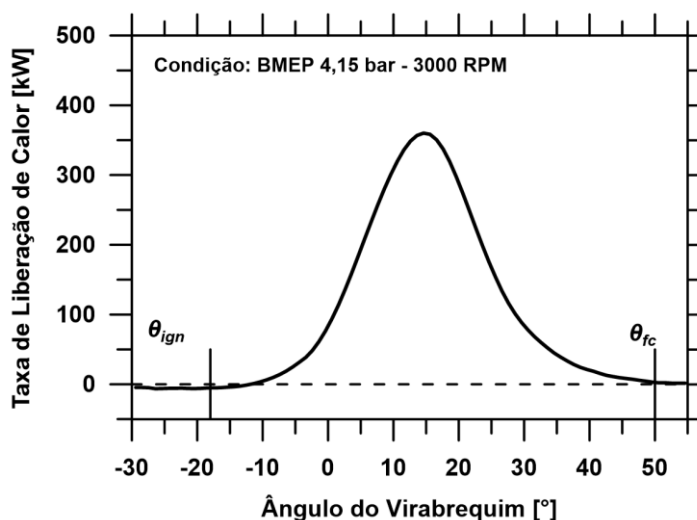


Figura A-2 – Curva base da taxa de liberação de calor obtida com a modelagem matemática

Integrando a taxa de liberação de calor na janela de -60 a 90° (ref. 0° PMS compressão), tem-se o calor total líquido aparente liberado pelo processo de combustão, ou seja, a energia que realmente alterou a pressão e temperatura média do gás no interior do cilindro.

$$Q_{at} = \int_{-60^\circ}^{90^\circ} \frac{\delta Q_a}{d\theta} d\theta$$

A fração de massa queimada é então calculada pela seguinte equação e mostrada na Figura A-3.

$$X_b(\theta) = \frac{100}{Q_{at}} \int_{-60^\circ}^{\theta} \frac{\delta Q_a}{d\theta} d\theta$$

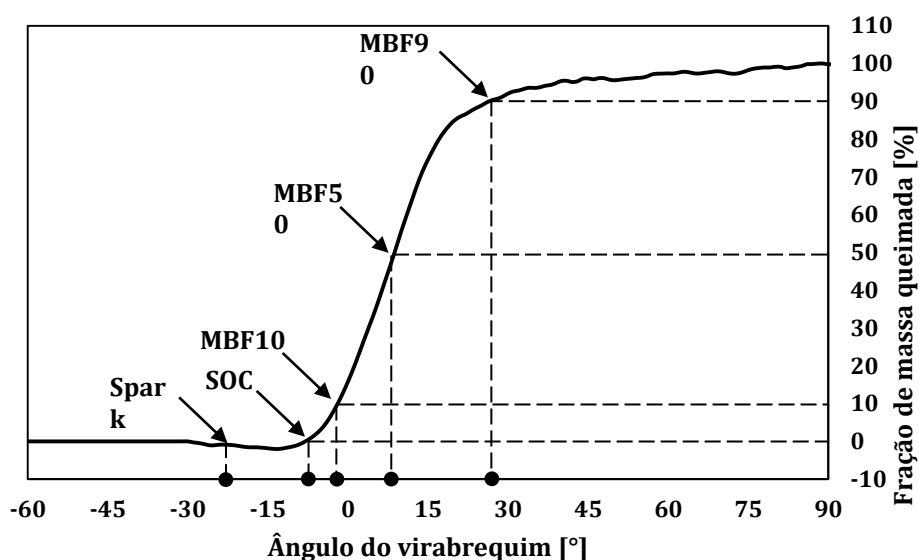


Figura A-3 – Curva base da fração de massa queimada obtida com a modelagem matemática

A partir da curva de fração de massa queimada é possível determinar os principais parâmetros do processo de combustão.

- *SOC*, posição angular do virabrequim referente ao início da combustão: determinado quando a curva de fração de massa queimada atinge derivada positiva e seu valor ultrapassa 0%.
- *MBF50*, posição angular do virabrequim referente à queima de 50% do combustível: determinado quando a curva de fração de massa queimada atinge 50%.

- *MBF10_90*, intervalo angular de deslocamento do virabrequim referente ao intervalo de queima de 10% do combustível até 90% (ângulo de queima rápida): determinado pela diferença angular quando a curva de fração de massa queimada atinge 90% e 10%.
- *MBF10_50*, intervalo angular de deslocamento do virabrequim referente ao intervalo de queima de 10% do combustível até 50% (primeira porção da queima): determinado pela diferença angular quando a curva de fração de massa queimada atinge 50% e 10%.
- *MBF50_90*, intervalo angular de deslocamento do virabrequim referente ao intervalo de queima de 50% do combustível até 90% (segunda porção da queima): determinado pela diferença angular quando a curva de fração de massa queimada atinge 90% e 50%.
- *Retardo de ignição*, intervalo angular de deslocamento do virabrequim referente ao intervalo de início da combustão e avanço de ignição: determinado pela diferença angular entre o momento da centelha e o SOC.

A taxa de liberação de calor pode ser normalizada e corresponde à derivada da curva de fração de massa queimada. Esta grandeza é mostrada na Figura A-4.

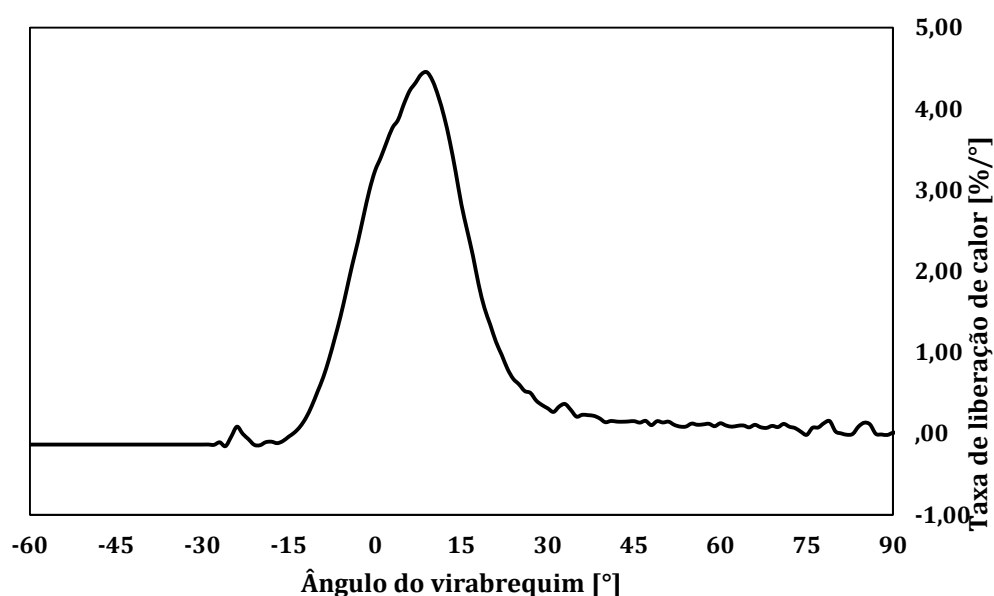


Figura A-4 – Curva base normalizada da taxa de liberação de calor obtida pela modelagem matemática

Nas Figuras A-5 a A-6 são ilustrados os posicionamentos dos sensores no banco de prova e indicados os dispositivos utilizados para mensurar/controlar algumas grandezas mostradas na Tabela 1. Por meio das figuras é possível observar os equipamentos utilizados para controle da temperatura da água, óleo e combustível e os locais de medição de pressão e temperatura na admissão e escapamento. São mostrados também a localização da sonda lambda, a tomada para medição da composição química dos gases no escapamento e posicionamento dos componentes base para o sistema de injeção e ignição, tais como injetor DI, bombas de combustível, vela de ignição e bobina, entre outros.

Especialmente na Figura A-7 tem-se uma visão geral dos sensores utilizados para obtenção de informações refinadas sobre o funcionamento do motor, ou seja, pressão dentro do cilindro, pressão do gás na admissão e no escapamento, sempre utilizando a base de tempo gerada por um encoder fixado ao virabrequim, que fornece resolução angular de $0,5^\circ$. Ainda nessa figura, detalha-se o injetor DI e a vela de ignição, sendo que os componentes citados são apresentados em conjunto com seu respectivo código para consulta.

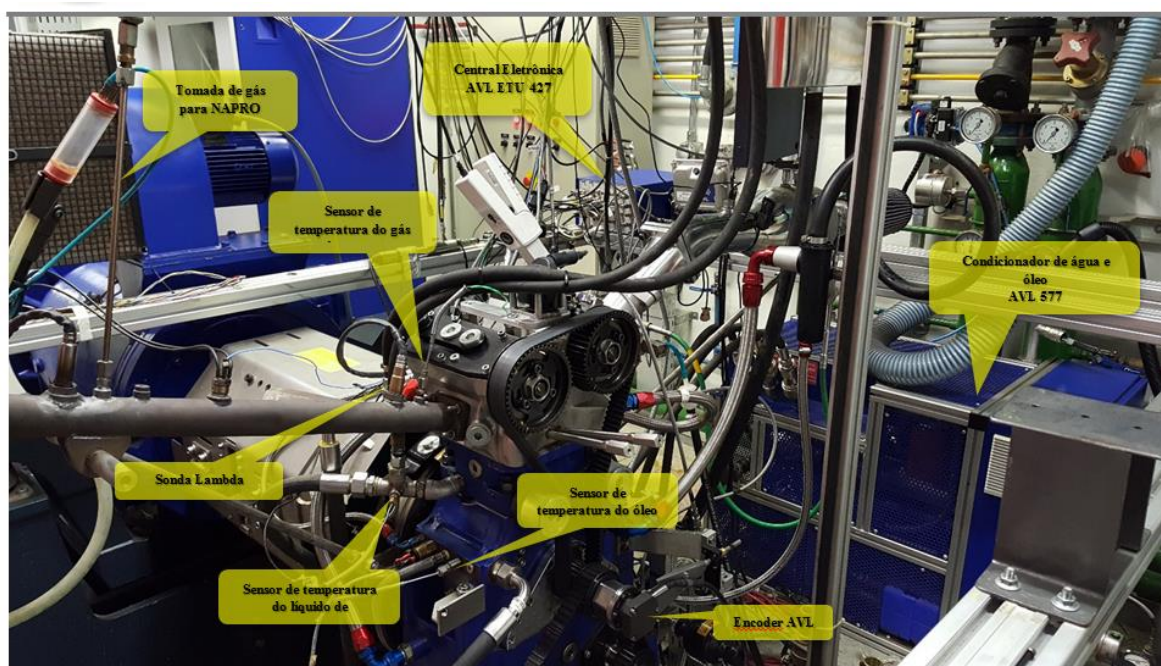


Figura A-5 – Vista geral da bancada de ensaios com SCRE (Fotografia – posição 1)

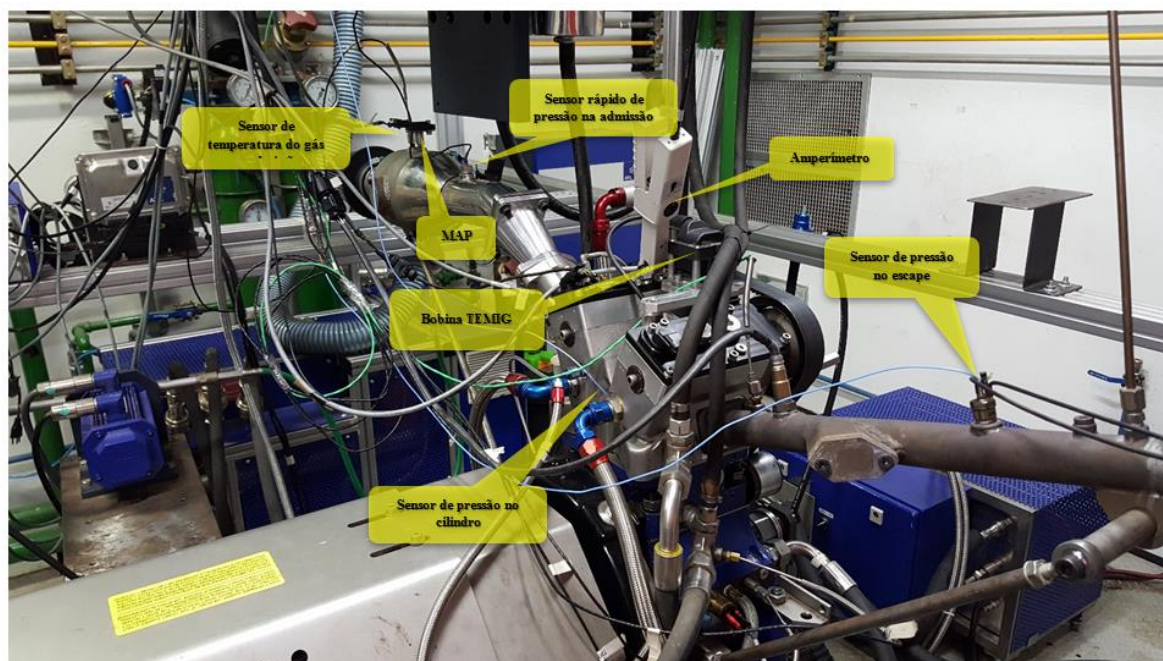


Figura A-6 – Vista geral da bancada de ensaios com SCRE (Fotografia – posição 2)

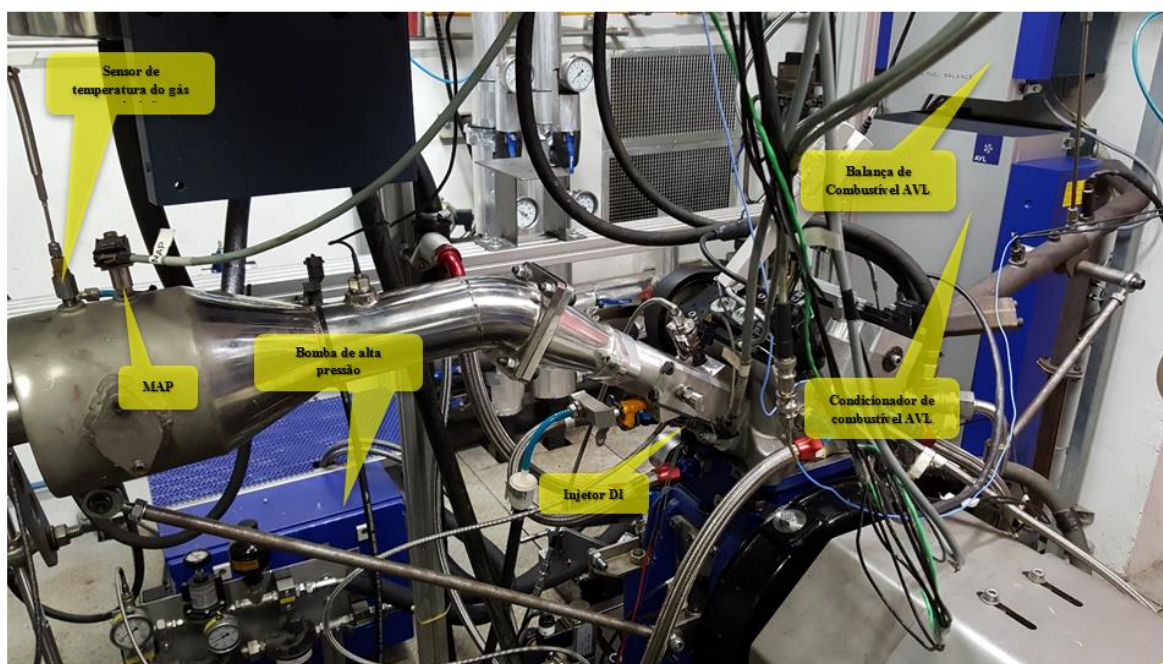


Figura A-7 – Visão geral da bancada de ensaios com SCRE (Fotografia – posição 3)

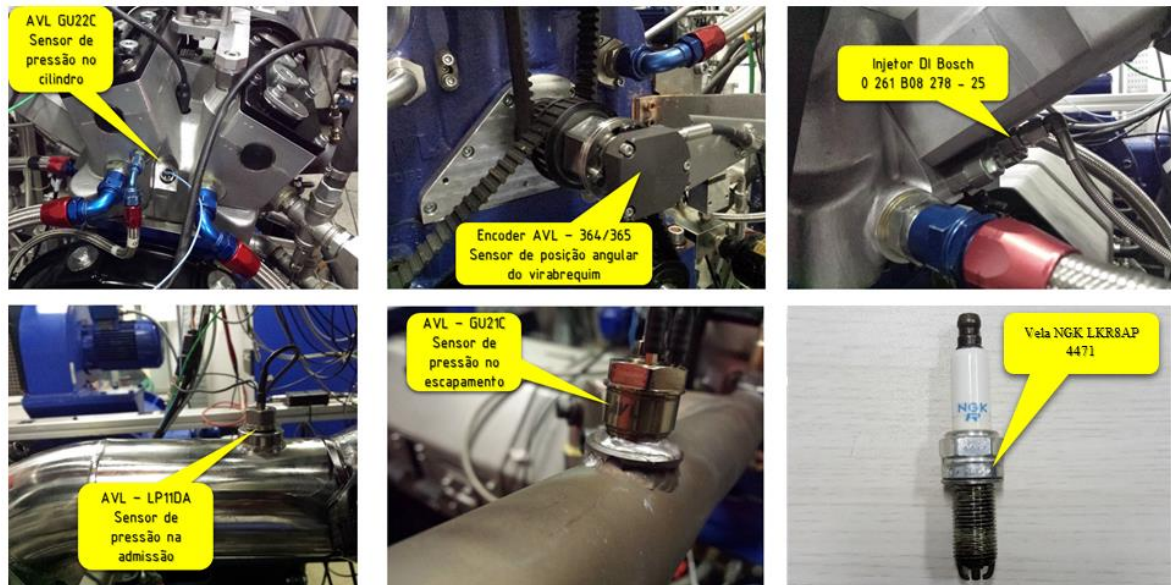


Figura A-8 – Visão detalhada dos sensores de monitoramento no INDICOM, injetor DI e vela de ignição.