

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO  
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

# Modelagem e Simulação de Motores à Combustão Interna por Técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD)

Autor: Fabio Roberto Sulzbacher Kasper

Orientador: Prof. Dr. Milton Mori

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química  
como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia  
Química.

Campinas – São Paulo

Fevereiro de 2003

UNICAMP  
BIBLIOTECA CENTRAL

UNICAMP  
BIBLIOTECA CENTRAL  
SEÇÃO CIRCULANTE

UNIDADE	30
Nº CHAMADA	T/UNICAMP
	K153m
V	EX
TOMBO BCI	53428
PROC.	124103
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	29/04/03
Nº CPD	

CM00183360-B

ind. 294039

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

K153m Kasper, Fabio Roberto Sulzbacher  
Modelagem e simulação de motores à combustão interna por técnicas da fluidodinâmica computacional (CFD) / Fabio Roberto Sulzbacher Kasper.--Campinas, SP: [s.n.], 2003.

Orientador: Milton Mori.  
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Automóveis - Ignição. 2. Motores de combustão interna. 3. Chama (Combustão). 4. Mecânica dos fluidos. 5. Modelos matemáticos. 6. Método dos volumes finitos. 7. Métodos de simulação. I. Mori, Milton. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Dissertação de Mestrado defendida por Fabio Roberto Sulzbacher Kasper e aprovada em 28 de Fevereiro de 2003 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



---

Prof. Dr. Milton Mori – Orientador



---

Dr. Alexandre de Paula Peres



---

Dr. Waldir Pedro Martignoni

00815302

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química.

  
\_\_\_\_\_  
Orientador

## Dedicatória

Dedico esta obra a nada mais, nada menos, que meus pais, os eternos Sr. Wilson e Dona Ana, os quais, sempre com grande amor e carinho, empenharam-se na árdua e penosa tarefa de me garantir toda educação e suporte necessários, desde o início, até o final desta jornada.

Dedico também às pessoas que acreditaram em meu potencial.

## Agradecimentos

Agradeço à toda minha família, e novamente a meus pais, por terem me dado todo apoio e, sobretudo, amor necessários à formação de meu caráter e conduta.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Milton Mori, pela oportunidade em seu grupo de pesquisa e pela confiança.

À FAPESP pelo apoio financeiro e à UNICAMP pela infra-estrutura fornecida.

Ao Eng. Dr. Waldir Pedro Martignoni da PETROBRAS, pela confiança e por toda ajuda fornecida, e acima de tudo, por persistir na realização deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Henry França Meier por me deixar usar sua infra-estrutura na FURB, durante a escrita desta dissertação, e pelos seus conselhos sempre cheios de sabedoria.

Aos colegas do LMSPQ, Alexandre, Anna Ritta, Cléber, Daniel, Edson, Graça, Karla, Sérgio, Wesley, pelas horas de convivência e companhia, imprescindíveis durante à espera das simulações. Em especial ao colega Leonardo, pelas dicas no  $\LaTeX$ .

Ao amigo turrão, mas de bom coração, José Wilson da Silva, pelas longas e relaxantes corridas nos finais de expediente.

Ao carisma dos eternos amigos, hoje colegas Engenheiros(as), dos tempos da FURB: “Boca”, “Bureta”, “Danielski”, “Karo”, “Negão”, “Rubão” e “Vini”.

Aos amigos da UNICAMP, Álvaro, Érica, Wagner, Francisleo, Marcelo, “João do Caminhão”, Marlus, Márcio, “Urso”, “Pinguim”, Zoran, “Padre”, e tantos outros que não mencionei, pelos bons momentos.

## Epígrafe

*Se fosse fácil, os americanos já teriam feito.*

– Anônimo

## Resumo

A performance dos motores à combustão interna e suas emissões são governadas por processos fluidodinâmicos não-estacionários. Um bom entendimento destes processos é fundamental para melhorar as características de um motor, e as técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD) são capazes de reproduzir informações detalhadas a respeito deste escoamento. Entretanto, simulações numéricas de motores ocorrem raramente, e um dos principais empecilhos destas simulações é justamente a dificuldade de abordar este problema, pois se esbarra com a complexidade geométrica do movimento do pistão e das válvulas, além das diversas interações fenomenológicas nos termofluidos presentes no cilindro. O objeto de estudo deste trabalho é a câmara de combustão de um motor FIAT Palio 1.0, com duas válvulas por cilindro e quatro estágios. O pacote computacional utilizado é o CFX-TASCflow<sup>TM</sup>, um código que se baseia no método dos volumes finitos, porém com abordagem em elementos finitos. Idealiza-se uma câmara de combustão bidimensional, e sua geometria é composta de um cilindro e duas válvulas, as quais, através de sub-rotinas personalizadas, movimentam-se em função do tempo. Para a turbulência, utiliza-se o modelo  $k - \varepsilon$  padrão. Objetiva-se neste trabalho estudar a combustão de diferentes combustíveis nesta câmara de combustão. Os combustíveis avaliados são o metano e o heptano, em que dois mecanismos de reação, um de simples e outro de dupla etapa, são avaliados para o metano, e um mecanismo com quatro etapas de reação é avaliado para o heptano, perfazendo assim três estudos de caso. Apresentam-se resultados qualitativos da fluidodinâmica do motor trabalhando a frio, isto é, sem reação, em que gráficos vetoriais e iso-superfícies de temperatura e pressão são exibidos ao longo dos vários estágios do motor, além de resultados quantitativos, referentes aos três estudos de caso, na forma de gráficos de temperatura, pressão e concentração medidos na base do pistão. Os principais resultados demonstram que a metodologia empregada, baseada nas técnicas de CFD, mostra-se apta a reproduzir o comportamento fenomenológico desta câmara de combustão. E verifica-se ainda, poucas diferenças entre os mecanismos de reação e os combustíveis avaliados a partir do modelo de combustão utilizado neste trabalho.

## Abstract

Internal combustion engine performance and exhaust emissions are governed by unsteady fluid dynamic processes. A clear understanding of these processes is fundamental to improving engine characteristics. Computational Fluid Dynamics (CFD) techniques are able to produce detailed information throughout the flow. However, numerical simulations of internal combustion engines occur rarely and one of its main issues is the difficulty to approach this problem. There is a complex geometric issue about the piston and valves movement and there are several interactions between the fluids within the combustion chamber. The target case of this work is the four-stroke combustion chamber of a FIAT Palio 1.0 containing two valves for each cylinder. The computational code used is CFX-TASCflow<sup>TM</sup> which is a finite volume code based on a finite element approach. A two-dimensional combustion chamber has been built and its geometry is composed by a cylinder and two valves which, through customized subroutines, there is motion in function of time. The standard form of  $k - \epsilon$  is used as the turbulence model. The objective of this work is to study several fuel combustion in this chamber. The chosen fuels are methane and heptane, where two reaction mechanisms, one single-step and another two-steps, are evaluated for methane, and a four-step overall mechanism is evaluated for the heptane, i.e. three study cases. First is presented the qualitative results of the engine fluid dynamics having no reaction, where vector plots and temperature and pressure isosurfaces are shown over the engine strokes. The quantitative results referring the three study cases are presented through temperature, pressure and concentration plots measured in the piston base. The main results demonstrate that the methodology used, based on the CFD techniques, reveals the applicability of its modeling and the combustion chamber behavior. Also is verified few differences between the reaction mechanisms and the fuels evaluated from the combustion model used in this work.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Pontos de Investigação . . . . .	2
1.2	Apresentação . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Revisão Bibliográfica</b>	<b>5</b>
2.1	Apresentação do Capítulo . . . . .	5
2.2	Resenha do Material Consultado . . . . .	5
<b>3</b>	<b>Modelagem Matemática</b>	<b>17</b>
3.1	Equações de Conservação . . . . .	17
3.2	Procedimentos de Decomposição . . . . .	18
3.2.1	Médias Temporais . . . . .	19
3.2.2	Médias Mássicas Ponderadas . . . . .	20
3.2.3	Relação entre Médias Temporais e Ponderadas . . . . .	21
3.3	Conservação da Massa . . . . .	21
3.4	Transporte da Quantidade de Movimento . . . . .	22
3.5	Conservação da Energia . . . . .	23
3.5.1	Forma Compressível para Baixas Velocidades . . . . .	25
3.5.2	Forma Compressível para Altas Velocidades . . . . .	25
3.6	Modelos de Turbulência . . . . .	26
3.6.1	Adequação das Equações de Conservação . . . . .	27
3.6.2	Modelo $k - \varepsilon$ Padrão . . . . .	28

3.7	Modelos de Combustão . . . . .	30
3.7.1	Equação de Transporte das Espécies Químicas . . . . .	31
3.7.2	Modelo de Dissipação Eddy . . . . .	32
3.7.3	Modificação da Equação da Energia . . . . .	33
<b>4</b>	<b>Métodos Numéricos</b>	<b>35</b>
4.1	MVF com Base em Elementos Finitos . . . . .	36
4.2	Esquemas de Interpolação . . . . .	38
4.2.1	Notação Geométrica . . . . .	43
4.2.2	Esquema de Perfil Linear (LPS) . . . . .	44
4.3	Acoplamento Pressão-Velocidade . . . . .	46
4.4	Compressibilidade . . . . .	48
<b>5</b>	<b>CFD em Motores</b>	<b>51</b>
5.1	Motores de Quatro Estágios e Curso do Pistão . . . . .	51
5.2	Curva de Came e Tempo de Abertura . . . . .	54
5.3	Solução dos Estágios do Motor . . . . .	57
5.4	Grid Numérico . . . . .	58
5.4.1	Estimativas Iniciais e Condições de Contorno . . . . .	58
5.4.2	Estratégias de Solução . . . . .	60
5.5	Estudos de Caso . . . . .	62
5.5.1	Caso 1: Metano – Simples Etapa de Reação . . . . .	62
5.5.2	Caso 2: Metano – Duas Etapas de Reação . . . . .	64
5.5.3	Caso 3: Heptano – Quatro Etapas de Reação . . . . .	65
5.6	Manipulação da Combustão . . . . .	67
<b>6</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>69</b>
6.1	Simulação Monofásica Mono-componente . . . . .	69
6.1.1	Primeira Exaustão . . . . .	70

6.1.2	Ângulo de Cruzamento . . . . .	72
6.1.3	Admissão de Fluido . . . . .	73
6.1.4	Compressão de Fluido . . . . .	75
6.1.5	Expansão . . . . .	77
6.1.6	Última Exaustão . . . . .	78
6.2	Simulação Monofásica Multi-componente . . . . .	78
6.2.1	Avaliação de Solução Independente entre as Malhas . . . . .	79
6.2.2	Estudo de Caso 1 . . . . .	81
6.2.3	Estudo de Caso 2 . . . . .	88
6.2.4	Estudo de Caso 3 . . . . .	93
6.2.5	Comparação entre os Estudos de Caso . . . . .	100
<b>7</b>	<b>Conclusões e Recomendações</b>	<b>103</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>108</b>

# Lista de Figuras

4.1	Definição de um volume de controle bidimensional. . . . .	37
4.2	Definição dos pontos de integração para um elemento 2-D quadrilátero. . . . .	37
4.3	Elemento de fluxo dividido em oito octantes com um octante removido. . . . .	38
4.4	Arranjo de um volume de controle, nó e ponto de integração. . . . .	39
4.5	Esquema de um arranjo bidimensional para interpolação SUDS. . . . .	41
4.6	Elemento de fluxo hexaédrico linear e com oito nós. . . . .	43
4.7	Pontos de Integração nas faces dos octantes coincidentes com $s = 0, 5$ . . . . .	44
4.8	Pontos de Integração nas faces dos octantes coincidentes com $t = 0, 5$ . . . . .	44
4.9	Pontos de Integração nas faces dos octantes coincidentes com $u = 0, 5$ . . . . .	45
4.10	Arranjo de um escoamento unidimensional em um duto de área constante. . . . .	49
5.1	Ilustração esquemática de um motor de duas válvulas por cilindro. . . . .	52
5.2	Os quatro estágios do pistão a partir da equação da senóide. . . . .	54
5.3	Ilustração genérica de um motor real. . . . .	55
5.4	Curva de levantamento das válvulas. . . . .	56
5.5	Os cinco estágios do motor a serem resolvidos neste trabalho. . . . .	57
5.6	Grid $A$ e suas condições de contorno. . . . .	59
5.7	Movimentação das válvulas: (a) válvula de admissão; (b) válvula de exaustão. . . . .	61
6.1	Mapa vetorial no instante de primeira exaustão. . . . .	70
6.2	Iso-superfícies na primeira exaustão: (a) pressão; (b) temperatura. . . . .	71

6.3	Mapa vetorial no ângulo de cruzamento. . . . .	72
6.4	Iso-superfícies no ângulo de cruzamento: (a) pressão; (b) temperatura. . .	73
6.5	Mapa vetorial no estágio de admissão. . . . .	74
6.6	Iso-superfícies no estágio de admissão: (a) pressão; (b) temperatura. . .	75
6.7	Mapa vetorial no estágio de máxima compressão. . . . .	76
6.8	Iso-superfícies na máxima compressão: (a) pressão; (b) temperatura. . .	76
6.9	Mapa vetorial no estágio de máxima expansão. . . . .	77
6.10	Iso-superfícies no estágio da expansão: (a) pressão; (b) temperatura. . .	78
6.11	Independência da pressão em relação aos grids <i>A</i> e <i>B</i> . . . . .	79
6.12	Independência da temperatura em relação aos grids <i>A</i> e <i>B</i> . . . . .	80
6.13	Estágios do motor em um diagrama do tipo P-V. . . . .	81
6.14	Estágios do motor em um diagrama do tipo T-V. . . . .	82
6.15	Diagrama P-V para o Caso 1. . . . .	83
6.16	Pressão vs. $\theta$ para o Caso 1. . . . .	84
6.17	Diagrama T-V para o Caso 1. . . . .	84
6.18	Temperatura vs. $\theta$ para o Caso 1. . . . .	85
6.19	Concentração de $CH_4$ para o Caso 1. . . . .	86
6.20	Concentração de $O_2$ para o Caso 1. . . . .	87
6.21	Concentração de produtos na etapa de expansão para o Caso 1. . . . .	87
6.22	Diagrama P-V para o Caso 2. . . . .	88
6.23	Pressão vs. $\theta$ para o Caso 2. . . . .	89
6.24	Comparação dos picos de pressão entre os Casos 1 e 2. . . . .	89
6.25	Diagrama T-V para o Caso 2. . . . .	90
6.26	Temperatura vs. $\theta$ para o Caso 2. . . . .	91
6.27	Comparação dos picos de temperatura entre os Casos 1 e 2. . . . .	91
6.28	Concentração de $CH_4$ para o Caso 2. . . . .	92
6.29	Concentração de $O_2$ para o Caso 2. . . . .	92

6.30	Concentração de intermediário, $CO$ , para o Caso 2. . . . .	94
6.31	Concentração de produtos finais, $CO_2$ e $H_2O$ , para o Caso 2. . . . .	94
6.32	Diagrama P-V para o Caso 3. . . . .	95
6.33	Pressão vs. $\theta$ para o Caso 3. . . . .	96
6.34	Diagrama T-V para o Caso 3. . . . .	96
6.35	Temperatura vs. $\theta$ para o Caso 3. . . . .	97
6.36	Concentração de $C_7H_{16}$ para o Caso 3. . . . .	98
6.37	Concentração de $O_2$ para o Caso 3. . . . .	98
6.38	Concentração dos produtos intermediários para o Caso 3. . . . .	99
6.39	Concentração dos produtos finais para o Caso 3. . . . .	100

# Lista de Tabelas

3.1	Constantes do Modelo $k - \varepsilon$ Padrão . . . . .	30
5.1	Características geométricas do motor FIAT Palio 1.0. . . . .	52
5.2	Controle de abertura das válvulas. . . . .	55
5.3	Estágios do motor em função do ângulo do virabrequim. . . . .	58
5.4	Condições de contorno para o motor. . . . .	59
5.5	Proposta de simulações para o caso 1. . . . .	64
5.6	Proposta de simulações para o caso 2. . . . .	65
5.7	Proposta de simulações para o caso 3. . . . .	67
5.8	Manipulação das constantes do modelo EDM ao longo da simulação. . . . .	68
6.1	Comparação dos picos de pressão e temperatura para os estudos de caso sem reação química. . . . .	100
6.2	Comparação dos picos de pressão e temperatura para os estudos de caso com reação química. . . . .	101

# Nomenclatura

## Letras Latinas

$a$	aceleração, $m/s^2$
$A$	área, $m^2$
$A_{ebu}$	constante do modelo de combustão EDM
$A_c$	fator pré-exponencial na equação de Arrhenius,
$B$	comprimento da biela, $mm$
$B_{ebu}$	constante do modelo de combustão EDM
$c_\mu, c_{\varepsilon 1}, c_{\varepsilon 2}$	constantes do modelo $k - \varepsilon$ padrão.
$c_P$	calor específico à pressão constante, $J.kg^{-1}.K^{-1}$
$C_A, C_B,$	concentração dos reagentes $A$ e $B$ , $kmol/m^3$
$dn$	índice da integral definida na superfície
$dv$	índice da integral definida no volume
$D_c$	diâmetro do cilindro, $mm$
$D_g$	diâmetro das guias de válvulas, $mm$
$D_{va}$	diâmetro da válvula de admissão, $mm$
$D_{ve}$	diâmetro da válvula de exaustão, $mm$
$e$	energia interna, $J/kg$
$E$	energia total, $J/kg$

$E_T$	temperatura de ativação, $K$
$f_i$	forças de corpo
$f_k$	fração mássica do primeiro produto formado na reação $k$
$F$	força, $kg.m/s^2 = N$
$h$	entalpia estática, $J/kg$
$H$	entalpia total, $J/kg$
$k$	energia cinética turbulenta, $m^2/s^2$
$\ell$	distância entre dois pontos de integração
$\ell_t$	comprimento de escala turbulenta
<b>L</b>	curso do pistão, $mm$
<b>Lm</b>	comprimento morto, $mm$
<b>Lv</b>	levantamento das válvulas, $mm$
$m$	massa, $kg$
$\vec{n}$	vetor unitário normal à superfície
$N$	número de conjuntos na média conjuntural
$P$	pressão, $Pa = N/m^2$
$Pr$	número de Prandtl
$P_k$	taxa de produção da energia cinética turbulenta, $Pa/s$
$Q$	fluxo de energia transferido por condução, $W/m^2$
$r$	massa estequiométrica
$R$	constante universal dos gases ideais, $J.kmol^{-1}.K^{-1}$
$R_k$	taxa de formação/consumo da $k$ -ésima reação, $kg.m^{-3}.s^{-1}$
$s$	distância ao longo da direção do escoamento e variável paramétrica
$S$	termo fonte

$Sc$	número de Schmidt
$t$	tempo, $s$ , e variável paramétrica
$T$	temperatura, $K = ^\circ C + 273$
$u$	componente de velocidade na direção $x$ , $m/s$ , e variável paramétrica
$U$	vetor velocidade, $m/s$
$v$	componente de velocidade na direção $y$ , $m/s$
$V_t$	escala turbulenta de velocidade
$Vol$	volume total de um volume de controle
$w$	componente de velocidade na direção $z$ , $m/s$
$W$	função de ponderação
$x$	vetor direção espacial e coordenada cartesiana espacial, $m$
$y$	coordenada cartesiana espacial, $m$
$Y$	fração mássica da espécie química
$z$	coordenada cartesiana espacial, $m$

## Letras Gregas

$\varepsilon$	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, $m^2/s^3$
$\phi$	propriedade escalar genérica
$\Phi$	razão de equivalência
$\varphi$	flutuação de uma propriedade escalar genérica
$\Gamma$	coeficiente de difusão
$\lambda$	condutividade térmica, $W.m^{-1}.K^{-1}$
$\mu$	viscosidade, $kg.m^{-1}.s^{-1}$
$\rho$	massa específica, $kg/m^3$

$\sigma_k, \sigma_e$	constantes do modelo $k - \varepsilon$ padrão.
$\tau$	tensor tensão viscoso
$\theta$	ângulo do virabrequim
$\xi$	constante qualquer

## Superescritos

*	indica flutuação
-	propriedade média temporal
~	propriedade média mássica ponderada
"	flutuação da média temporal
'	flutuação da média mássica ponderada
→	vetor
$f$	relativo a formação
$m$	expoente na concentração do reagente $B$ na expressão de Arrhenius
$n$	expoente na concentração do reagente $A$ na expressão de Arrhenius e número de espécies químicas presentes na reação
$\beta$	expoente da temperatura na expressão de Arrhenius
$\phi$	relativo a uma propriedade escalar genérica

## Subscritos

$cin$	relativo a cinético
$e$	ponto de integração e centro da face leste do volume de controle
$ef$	valor efetivo
$f$	relativo ao combustível

$i$	índice de direção espacial e espécie química
$ip$	ponto de integração
$j$	índice de direção espacial
$k$	índice de reação
$n$	índice da integral definida na superfície
$NP$	ponto nodal
$o$	relativo ao oxidante e propriedade no passo de tempo anterior
$p$	relativo ao produto
pistão	relativo ao pistão
$u$	ponto de integração
$v$	índice da integral definida no volume
$w$	centro da face oeste do volume de controle
$W, E, N, S, T, B$	pontos nodais a oeste, leste, norte, sul, cima e baixo, respectivamente
$t$	valor turbulento

## Símbolos e Operadores

$exp$	exponencial
$lim$	limite
$min$	mínimo entre valores
$\delta$	operador diferencial e delta de Kronecker
$\Delta$	diferença de uma variável
$\langle \dots \rangle$	média

# Siglas

<b>AMG</b>	Algebraic Multi-Grid
<b>BLOCK-STONE</b>	algoritmo de solução de matrizes
<b>CAD</b>	Computer Aided Design
<b>CDS</b>	Central Differencing Schemes
<b>CFD</b>	Computational Fluid Dynamics
<b>CFX</b>	código comercial de CFD
<b>CNTP</b>	Condições Normais de Temperatura e Pressão
<b>CFX-TASCflow<sup>TM</sup></b>	código comercial de CFD utilizado neste trabalho
<b>EBU</b>	Eddy Break-Up model
<b>EDM</b>	Eddy Dissipation Model
<b>FLOW-3D</b>	antecessor do código comercial CFX
<b>FLUENT</b>	código comercial de CFD
<b>GNV</b>	Gás Natural Veicular
<b>HUW</b>	Higher UpWind differencing Scheme
<b>KIVA</b>	código comercial de CFD
<b>KIVA-3</b>	código comercial de CFD
<b>KIVA-3V</b>	código comercial de CFD
<b>LDA</b>	Laser Doppler Anemometry
<b>LDV</b>	Laser Doppler Velocimetry
<b>LES</b>	Large Eddy Simulation
<b>LIF</b>	Laser Induced Fluorescence
<b>LPS</b>	Linear Profile Scheme
<b>MVF</b>	Método dos Volumes Finitos

<b>MWS</b>	Mass Weighted Scheme
$NO_x$	variações do óxido nítrico
<b>PAC</b>	Physical Advection Correction Schemes
<b>P-V</b>	diagrama Pressão-Volume
<b>PM</b>	Peso Molecular
<b>PMI</b>	Ponto Morto Inferior
<b>PMS</b>	Ponto Morto Superior
<b>QUICK</b>	Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics scheme
<b>RANS</b>	Reynolds Average Navier-Stokes Equations
<b>SIMPLEC</b>	Semi IMPLICIT Linked Equations Consistent
<b>SPECTRUM</b>	código comercial de CFD
<b>SUDS</b>	Skewed Upstream Schemes
<b>STAR-CD</b>	código comercial de CFD
<b>T-V</b>	diagrama Temperatura-Volume
<b>TDMA</b>	Tri-Diagonal Matrix Algorithm
<b>UDS</b>	Upstream Differencing Schemes

# Capítulo 1

## Introdução

A performance dos motores à combustão interna e suas emissões são governadas por processos fluidodinâmicos não-estacionários. Um bom entendimento destes processos é fundamental para melhorar as características de um motor, e as técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD) são capazes de reproduzir informações detalhadas a respeito deste escoamento.

Entretanto, simulações numéricas de motores ocorrem raramente e um dos principais empecilhos destas simulações é justamente a dificuldade de abordar este problema. Primeiramente, esbarra-se com a complexidade geométrica da situação, pois há um movimento mútuo, tanto do pistão, quanto das válvulas de admissão e exaustão. E ainda, no interior de cada cilindro ocorrem diversas interações fenomenológicas nos termofluidos presentes, destacando-se: escoamento turbulento e transiente com transferência de calor; injeção, atomização, dispersão e evaporação do combustível líquido; ignição e combustão da mistura gasosa; e a formação subsequente de poluentes perigosos, incluindo  $NO_x$ , hidrocarbonetos não queimados, além de fuligem (GOSMAN, 1999).

Felizmente, a modelagem e simulação de motores à combustão interna está tornando-se cada vez mais comum no meio científico, uma vez que a necessidade de conhecer e otimizar este processo é um grande desafio e pode trazer imensos benefícios, seja para o consumidor, em se tratando de economia de combustível, seja no meio ambiente, em se tratando de emissões.

## 1.1 Pontos de Investigação

Este trabalho fundamenta-se na proposta de aplicar as modernas técnicas da fluidodinâmica computacional (CFD) no estudo do escoamento termofluido, turbulento e reativo no interior de uma câmara de combustão de um motor à ignição por faísca e com quatro estágios. A câmara de combustão em questão é a de um FIAT Palio 1.0 com duas válvulas por cilindro e o pacote computacional utilizado é o CFX-TASCflow<sup>TM</sup>.

A abordagem do problema é bidimensional, por se tratar de redução significativa de esforço computacional, e pretende-se avaliar a combustão de hidrocarbonetos através de um modelo de combustão conhecido como EDM (*“Eddy Dissipation Model”*). Inicialmente se pretendia implantar um modelo de cinética química para avaliar os efeitos da combustão no interior desta câmara, entretanto, ao longo desta dissertação justificar-se-á o porquê da não utilização de uma expressão cinética de taxa de reação, e a opção por uma outra expressão dentro do modelo EDM. Sua geometria é composta de um cilindro e duas válvulas, e este conjunto pistão/válvulas é movimentado ao longo do tempo através de sub-rotinas personalizadas, para a correta reprodução da dinâmica de um cilindro automotivo real, especificamente a de um FIAT Palio 1.0.

Almeja-se primeiramente, evidenciar e discutir todas as características fenomenológicas presentes nesta câmara de combustão, além de estudar variáveis importantes como pressão e temperatura para um motor trabalhando a frio, isto é, sem reação química. Pretende-se também avaliar a concentração das espécies químicas envolvidas nos casos em que houver combustão. Estudam-se dois combustíveis, o metano e heptano, ambos hidrocarbonetos alifáticos, e sob diferentes mecanismos de reação. Analisar-se-á a influência destes mecanismos e/ou combustíveis acerca das variáveis de interesse para o objeto de estudo desta investigação científica.

## 1.2 Apresentação

Esta dissertação constitui de sete capítulos. Este primeiro capítulo, refere-se a um breve comentário a respeito de motores à combustão interna, objeto de estudo das simulações numéricas, e os pontos específicos a serem investigados neste trabalho. O Capítulo 2 compreende a resenha de todo material bibliográfico consultado dentro da linha de pesquisa desenvolvida para o projeto durante sua realização. No Capítulo 3, apresenta-se uma breve revisão sobre toda modelagem matemática pertinente a este trabalho, enquanto que o Capítulo 4 apresenta uma descrição mais profunda dos métodos

numéricos utilizados pelo código CFX-TASCflow<sup>TM</sup>.

O Capítulo 5 ilustra uma sucinta noção a respeito de motores, suas características operacionais e os cuidados na sua modelagem, tais como a manipulação do grid numérico e da combustão, e ainda a proposta dos estudos de caso dos combustíveis a serem avaliados. O Capítulo 6 apresenta e discute todos os resultados referentes aos estudos de caso propostos no capítulo anterior. Primeiramente, dá-se ênfase ao aspecto fluidodinâmico do motor, como o escoamento no interior do cilindro, ao redor das válvulas e dos dutos de admissão e exaustão. Em seguida, apresentam-se, em forma de gráficos quantitativos, os efeitos dos estudos de caso nas variáveis de interesse a serem investigadas. Finalizando, no Capítulo 7, apresentam-se as conclusões e considerações finais deste projeto, apontando todas as particularidades relevantes para uma possível continuação deste trabalho em etapas futuras. E encerrando esta dissertação, estão todas as referências bibliográficas que foram utilizadas neste projeto de pesquisa.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

### 2.1 Apresentação do Capítulo

O principal intuito deste capítulo é apresentar, de uma forma clara e objetiva, o material bibliográfico básico sobre a aplicação de técnicas da fluidodinâmica computacional (CFD) para a simulação de motores. Além da apresentação das principais características, resultados e conclusões obtidas com os modelos e métodos utilizados pelos pesquisadores consultados, procurar-se-á definir alguns pontos básicos que nortearão as características da metodologia a ser seguida nesta investigação científica.

A coleta dos trabalhos a serem discutidos a seguir evidentemente não abrange todos os trabalhos publicados nos últimos anos de pesquisa na área de motores, mas representa uma amostragem significativa dos estudos de simulação desta linha de pesquisa, incluindo técnicas de CFD e experimentais realizadas ultimamente. Nos próximos capítulos este material e outros serão resgatados e discutidos mais profundamente quando se fizerem por necessário.

### 2.2 Resenha do Material Consultado

A literatura apresenta pouca quantidade de material bibliográfico sobre motores. É evidente que esta pouca quantidade referida é em comparação com demais assuntos comumente encontrados na literatura. Restringindo este assunto na linha de pesquisa da fluidodinâmica computacional, os trabalhos encontrados são mais raros ainda. Acredita-se que isto aconteça devido a dois fatores, o primeiro é que estudos de CFD em motores começaram a surgir somente no início dos anos 90 do século XX. O outro fator é

a própria indústria automobilística, pois esta sem dúvida é a maior interessada nos avanços deste tipo de pesquisa. Todas e quaisquer descobertas e melhorias fazem com que esta indústria mantenha tais informações sigilosas de forma a tirar proveitos futuros para si própria.

Um dos primeiros trabalhos de CFD aplicados a motores foi o trabalho de KIM *et al.* (1990), em que estes investigaram o efeito transiente do escoamento gasoso com indução de spray combustível em um motor a gasolina do tipo injeção direta. Para melhor compreensão do escoamento e da admissão de combustível no interior do cilindro, os autores trabalharam com dois tipos de base do pistão, uma plana e outra irregular, nos instantes de admissão e de máxima compressão do pistão. O pacote computacional utilizado foi o KIVA-3V, a geometria era tridimensional e composta por um pistão e quatro válvulas no cilindro. Um modelo específico de choque de spray combustível também foi utilizado para que os autores realizassem este estudo. Suas principais conclusões foram que os efeitos de giro foram, de maneira satisfatória, representados numericamente pelo movimento do pistão e das válvulas para ambos tipos de base plana e irregular no cilindro do motor em questão.

No ano seguinte, PINCHON (1991) explora mais profundamente a utilização de técnicas de CFD em motores. Neste trabalho, o autor comenta brevemente as dificuldades de se lidar com tal aplicação, citando as complexidades de sua modelagem, tais como: o motor é um sistema termodinâmico aberto com duas fases que podem coexistir na câmara de combustão (mistura gás/líquido combustível); a necessidade de abordar o problema em regime transiente, uma vez que há o deslocamento temporal do pistão e o trabalho das válvulas em função do ângulo do virabrequim; as câmaras de combustão são tridimensionais e suas características geométricas são complexas. Estes aspectos não podem ser ignorados quando pretendem-se realizar trabalhos de otimização. Em virtude do deslocamento do pistão, as paredes do cilindro fazem um papel muito importante no escoamento em seu interior, como perdas de calor, hidrocarbonetos não queimados e algumas zonas quentes (“*hot spots*”), além de que o escoamento é altamente turbulento em virtude dos altos gradientes de pressão ao longo do tempo, influenciando assim em todo o processo de combustão. Neste processo, uma vez que várias reações químicas complexas ocorrem simultaneamente, a tentativa de implementar um modelo cinético para cada reação química levaria a uma infinidade de problemas, tanto numéricos quanto de implementação, pois parâmetros cinéticos haveriam de ser levantados afim de se obter certa coerência física nos resultados para propósitos futuros de validação de dados experimentais.

Após esta descrição, o autor apresenta toda modelagem matemática e fundamentação teórica necessária, além de comentar sobre o pacote computacional utilizado, KIVA, conhecido por ser específico para tal tipo de aplicação. O modelo de turbulência  $k-\epsilon$  padrão foi empregado e o autor apresentou três estudos de caso em seu trabalho: um grid tridimensional relativamente simples, face à tecnologia da época, para realização de uma modelagem a frio (somente ar); um grid axi-simétrico em que a hipótese de simetria aplica-se para a realização dos cálculos; e um último caso de um motor a diesel. Em todos os estudos de caso, os perfis de velocidade e pressão calculados são comparados com dados experimentais apresentando boa concordância. E por fim, metodologias de como modelar as condições de contorno nas válvulas, a transferência de calor nas paredes do domínio e a faísca necessária para o início da combustão, são comentadas.

Na época, suas conclusões básicas foram que tais tipos de aplicação seriam trabalhos em constante evolução. Apesar de todas as simplificações que o autor utilizou, boa concordância com dados experimentais foram visualizadas devido aos grandes cuidados tomados com sua simulação, tais como a opção de bons modelos de turbulência, manipulação correta das condições de contorno, entre outros fatores.

STEVENSON e CHEN (1997) apresentam em seu trabalho um estudo específico sobre o comportamento fluidodinâmico de uma válvula de admissão de um motor à combustão interna utilizando um pacote computacional denominado de FLOW-3D, antecessor do agora conhecido como CFX-4. Além de uma breve revisão bibliográfica e fundamentação teórica, os autores apresentam uma comparação empírica, teórica e numérica da queda de pressão através de uma válvula. A válvula utilizada foi a mesma de um estudo experimental anterior realizado por Kleinig *et al.* (1995). Com base neste estudo, os autores ainda adicionaram mais três outros resultados teóricos e experimentais para validação da modelagem em CFD. Assim, uma correlação empírica, uma teórica e dados experimentais de queda de pressão são utilizadas para comparação com os resultados numéricos. Os dados de queda de pressão numéricos apresentaram boa concordância com os demais. A representação da válvula é bidimensional, o modelo de turbulência utilizado foi o  $k-\epsilon$  padrão e o algoritmo de acoplamento pressão-velocidade empregado foi o SIMPLEC (VANDOORMAAL e RAITHBY, 1984). Em seguida alguns resultados qualitativos na região da válvula são apresentados, como perfis de velocidade, pressão e propriedades turbulentas, além de suas principais conclusões de seu trabalho.

DESCHAMPS e BARITAUD (1997), por outro lado, estudaram experimentalmente um motor de quatro válvulas e desenvolveram indiretamente um método

de mapeamento dos gases provenientes da combustão deste motor. O método foi baseado em uma técnica chamada LIF (“*Laser Induced Fluorescence*”) combinada com um dispositivo muito conhecido para medidas experimentais denominado LDV (“*Laser Doppler Velocimetry*”). Assim, um monitoramento de todos os gases internos e externos à câmara de combustão foi levantado variando alguns parâmetros para várias condições operacionais diferentes do motor. Estas variações incluem a modificação de condições de injeção combustível e reciclagem dos gases causando diferentes fenômenos na câmara e levando a perdas de calor inconstantes e características atípicas de emissão destes gases. Alguns efeitos devido a alta reciclagem destes gases foram visualizados, tais como altas concentrações de combustível em regiões de baixa velocidade, acarretando assim, em uma maior probabilidade de formação de  $\text{NO}_x$  nestas regiões. Estes resultados são muito perceptíveis, quando comparados com fenômenos visualizados em um motor visto como padrão, conclusão esta obtida pelos pesquisadores.

Ainda neste ano, HONG e TARNG (1997) apresentaram uma boa técnica para medição direta e numérica, a primeira experimental e a segunda a partir de técnicas de CFD, para uma propriedade conhecida como comprimento de escala turbulenta para o escoamento no interior do cilindro de um motor. A técnica experimental foi aplicada em dois pontos de medição simultâneos com o auxílio de duas sondas LDV. Os autores construíram o motor com material transparente, a base de quartzo, para facilitar a visualização dos fenômenos em seu interior. O artigo compara os dados experimentais com os comprimentos de escala turbulenta resultantes do modelo  $k-\epsilon$  padrão. O pacote computacional utilizado foi o KIVA-3 e as comparações entre resultados experimentais e numéricos apresentaram um nível razoável de concordância, tanto qualitativa quanto quantitativamente para este complexo tipo de escoamento.

No ano seguinte, WERNER *et al.* (1998) realizaram um projeto ambicioso. Uniram-se forças entre uma universidade, uma indústria automobilística, ambas alemãs, e uma fabricante de computadores, para a otimização do tempo computacional necessário para a simulação de motores à combustão interna por técnicas de CFD. O projeto em sua fase inicial durou cerca de seis meses para toda a equipe, desde a análise da geometria, construção da malha numérica, definição das condições de contorno, modelagem matemática, pós-processamento, entre outros. O maior objetivo era reduzir este absurdo tempo inicial que era de seis meses para uma semana. Mas isto, claro, pôde ser alcançado facilmente para uma mesma geometria, já previamente preparada, e com técnicas de paralelização do domínio computacional. As simulações ocorreram em

estações de trabalho contendo desde 1 até 32 processadores trabalhando em paralelo, e os tempos computacionais foram comparados em relação ao tempo necessário para simular o ciclo com um processador somente. Os autores comparam ainda os resultados numéricos da chama, após a ignição, com observações experimentais. O código computacional utilizado foi o STAR-CD, também conhecido como ser de natureza específica para este tipo de aplicação, e os objetivos do trabalho foram concretizados reduzindo significativamente o número de células do domínio computacional e paralelizando, de uma maneira efetiva, todo o domínio de cálculo.

Um ano depois GOSMAN (1999) relata o panorama do estado da arte no que se refere a simulação e projeto de motores à combustão interna por técnicas de CFD. O autor divide e discute seu trabalho em duas grandes frentes, uma a respeito da metodologia de solução e outra a respeito da modelagem física deste estudo de caso. Apresentar-se-á abaixo uma breve síntese do que o autor ilustra em seu artigo.

Na metodologia de solução, o autor inicia comentando sobre a flexibilidade das malhas numéricas utilizadas e uma pequena gama de códigos computacionais específicos para este tipo de aplicação, destacando alguns benefícios e defeitos entre os códigos. Alguns códigos trabalham com malhas hexaédricas estruturadas, com esquema multi-blocos, ou ainda, não-estruturadas, contendo os mais diversos tipos de elementos, como tetraedros, prismas, pirâmides e até mesmo elementos hexaédricos com a possibilidade de mescla com os tipos anteriores. Esta classe de malha numérica é conhecida como “malha híbrida”.

Sabe-se da complexidade geométrica de um motor e seus componentes. Face a isto, cada vez mais ocorrem buscas pré-processadores automatizados. Estes, em síntese, abrem e manipulam geometrias construídas em ferramentas do tipo CAD e são capazes de criar automaticamente toda a orientação dos blocos, dependendo do código a ser utilizado trabalhar com malhas estruturadas, e projetar corretamente as faces destes blocos nas fronteiras reais da geometria (CAD). Uma vez concluída esta etapa, o usuário só define um número máximo, por exemplo, de volumes de controle que o grid precisa conter. Assim, com base nestas informações, o próprio pré-processador se encarrega de construir automaticamente o grid, dando como resultado final, a malha numérica pronta para ser utilizada.

Uma vez acertada esta malha numérica, parte-se para a escolha de bons esquemas de interpolação. O autor sugere esquemas de segunda ordem para discretização espacial, os quais combinam acurácia e ajudam a minimizar problemas como a difusão

numérica, por exemplo. Desenvolvimentos estão sendo focalizados para a discretização temporal. Na grande maioria dos problemas transientes resolvidos por CFD ainda é utilizado um esquema de primeira ordem na integração temporal. Acima disto, a opção por um bom módulo matemático capaz de resolver as matrizes resultantes da discretização numérica também deve ser levado em conta. No início dos anos 80, PATANKAR (1980) optava pela utilização de eliminação gaussiana ou TDMA. Atualmente, utilizam-se métodos mais robustos de solução como BLOCK STONE, AMG (HUTCHINSON e RAITHBY, 1986), entre outros.

O processamento paralelo é um objetivo comum para todos que trabalham com CFD. Uma maneira efetiva e robusta de decomposição do domínio de cálculo em “ $n$ ” subdomínios, de acordo com os “ $n$ ” processadores disponíveis, para o usuário é sem sombra de dúvidas sua maior ambição. Atualmente, poucos códigos conseguem realizar este procedimento de maneira robusta, satisfatória e sem quaisquer comprometimentos com o resultado final da simulação. Os vendedores dos códigos prometem uma relação linear (tempo/ $n^{\circ}$  de processadores), ou seja, caso disponha-se de um computador com dois processadores e o usuário está interessado em acelerar o tempo de solução, este gastaria a metade do tempo necessário para resolver o mesmo problema com um processador somente. Infelizmente, isto ainda não é uma realidade. Perde-se tempo devido a uma série de fatores, tanto de “*software*” como de próprio “*hardware*” mas certamente acredita-se que isto ainda evoluirá muito futuramente.

Quanto à modelagem dos processos físicos de um motor, a turbulência assume papel principal nos efeitos de transferências de calor e massa, o que interfere diretamente nas reações químicas no meio. Usualmente ainda emprega-se o uso de modelos de turbulência como o  $k-\varepsilon$  padrão (LAUNDER e SPALDING, 1974), o qual tem uma aplicação muito extensa na área de CFD. Entretanto, HAWORTH e JANSEN (2000), discutidos posteriormente, realizaram um dos primeiros estudos com outro modelo de turbulência.

A modelagem da injeção de combustível, combustão e emissão de gases também avançam com o passar dos anos. Modelos matemáticos incluindo mudanças de fase, como cavitação e atomização, passam a ser indispensáveis para enriquecimento deste estudo. À medida em que hipóteses menos simplificadoras são tomadas, parte-se cada vez mais para a simulação representativa da situação física real. Pouquíssimos trabalhos na literatura obtiveram tais resultados, embora acredita-se que este quadro mudará com o passar dos anos.

E para finalizar, o pesquisador comenta sobre desenvolvimentos futuros des-

tacando o modelo de turbulência LES. Ele acredita fortemente que simulações com LES substituirão os atuais modelos de turbulência implementados nos códigos computacionais e conhecidos da literatura. E como conclusão, o autor destaca que a simulação de motores atualmente está em um estágio útil para projeto e dimensionamento, ao contrário dos objetivos primordiais do passado, que eram somente em caráter de pesquisa. Este avanço deve-se a vários fatores, tais como desenvolvimento da informática e dos códigos computacionais comerciais, modelos físicos mais extensos, geradores automáticos de grids, etc.

Ainda no mesmo ano, BAILLY *et al.* (1999) apresentam um código computacional desenvolvido por vários parceiros, através de uma mescla do método dos volumes finitos com o método dos elementos finitos. O código é capaz de manipular partes móveis de um grid, como pistão e válvulas, de uma maneira automatizada. Uma malha numérica relativamente simples é utilizada para todos os cálculos sem que haja intervenção do usuário. Um esquema de interpolação espacial de quarta ordem, entre as faces dos volumes de controle, e outro de primeira ordem em relação ao tempo são utilizados no código. O trabalho é parte de um grande programa de validação do código para com este tipo de aplicação. Comparações entre dados experimentais e numéricos de admissão e em um estágio de compressão máxima do pistão são apresentadas no trabalho.

Quanto à investigação experimental, conduziu-se em um simples cilindro de um motor contendo quatro válvulas por cilindro. A intensidade de turbulência e as componentes de velocidade foram extraídas a partir de um aparato experimental com medidas de LDV. As comparações entre dados experimentais e numéricos foram efetuadas em diferentes posições da câmara de combustão e em diferentes ângulos do virabrequim. Os autores visualizaram boa concordância entre os dados medidos e os resultados obtidos a partir do pacote computacional.

HAWORTH e JANSEN (2000) realizaram um trabalho revolucionário. Certamente foi um dos primeiros artigos na aplicação de motores utilizando um modelo de turbulência relativamente novo na área de CFD chamado de LES (“*Large Eddy Simulation*”). Ultimamente, escoamentos das mais diversas naturezas eram, e ainda são, resolvidos através das equações médias temporais de Reynolds, também conhecidas como RANS (“*Reynolds Average Navier-Stokes Equations*”). Para escoamentos turbulentos com aplicação de RANS pode-se optar entre duas grandes classes de modelos de turbulência, os de primeira ordem, também conhecidos como modelos de viscosidade

“Eddy”, tais como  $k-\varepsilon$  padrão (LAUNDER e SPALDING, 1974), RNG  $k-\varepsilon$  (YAKHOT *et al.*, 1992),  $k-\omega$  (WILCOX, 1986) e  $k-\omega$  modificado (MENTER, 1994), entre outros. Há ainda os modelos de turbulência de segunda ordem como o RSM (“*Reynolds Stress Models*”) (CLARKE e WILKES, 1989) por exemplo.

Uma alternativa para o RANS é o LES. Neste último, as equações de transporte, ao invés de decompô-las em médias temporais, estas são filtradas espacialmente. Efeitos explícitos são levados em conta na estrutura dos escoamentos que ficam na ordem do espaçamento do grid numérico. Assim, exige-se um grid bastante refinado para os cálculos deste modelo. Pelo fato do LES resolver escalas menores de turbulência, espera-se que futuramente este modelo de turbulência tenha uma aplicabilidade tão grande quanto o RANS tem atualmente.

Os autores testaram alguns estudos de caso, comparando os resultados obtidos com soluções analíticas e/ou experimentais, dependendo do caso em questão. No entanto, destaca-se um destes estudos de caso. É uma simples geometria de um pistão e uma válvula. A válvula está constantemente parada e somente o pistão é quem move-se ao longo do tempo. Os resultados deste caso são comparados com observações experimentais anteriores. A maior conclusão dos autores quanto a este trabalho foi que a aplicação de LES para escoamentos em motores é uma grande promessa para o futuro, devido a grande flexibilidade e acurácia deste modelo de turbulência para os mais diversos escoamentos encontrados na natureza.

Em um trabalho puramente experimental, CHAN e TURNER (2000) apresentam a aplicação de um LDA (“*Laser Doppler Anemometry*”), um medidor experimental para três componentes de velocidade, radial, tangencial e axial, na investigação da estrutura do escoamento no interior de um cilindro de um motor à combustão interna. É um cilindro relativamente simples porém representativo. Possui ignição por faísca, no entanto não há combustão. Os autores objetivam estudar a influência do arranjo da entrada do cilindro durante os estágios de admissão e compressão somente. Eles acreditam que para um motor a frio, estes dados de admissão e compressão são representativos e válidos para o escoamento de um motor real antes da combustão.

Os resultados para uma configuração de entrada inclinada revelam a complexidade da natureza tridimensional do escoamento no interior do cilindro. Apesar de não ser surpreendente, os resultados também mostram que com a configuração da entrada inclinada, condições de uma mistura mais homogênea no cilindro são visualizadas, além da boa recirculação e bom comportamento do escoamento durante o estágio de

compressão máxima.

Em seu trabalho, os pesquisadores também comentam as dificuldades encontradas para a realização das medidas experimentais. Durante as corridas experimentais, eles explicam os problemas emergentes devido a alta instabilidade dos dados tridimensionais neste tipo escoamento. Eles ainda comentam sobre desenvolvimentos futuros, como aplicação de PIV (“*Particle Image Velocimetry*”) para extração de dados. E como principal conclusão, os autores comentam a importante evidência do escoamento no interior do cilindro devido a configuração da porta de admissão de combustível neste motor.

FAN e REITZ (2000) apresentam a simulação numérica da preparação da injeção do combustível em um motor de ignição por faísca e sua subsequente combustão. Os autores utilizaram o pacote computacional KIVA-3, o qual inclui modelagem para atomização (“*spray*”), efeitos de choque destas gotas nas paredes do domínio e modelos específicos de combustão. Em particular, eles utilizaram um modelo de ignição chamado DPIK (“*Discrete Particle Ignition Kernel*”) para representar a criação e propagação da chama no interior do domínio. Este modelo usa o enfoque Euleriano-Lagrangeano nos cálculos. Isto faz com que as partículas sirvam como verdadeiros traçadores para localização da origem da chama. A atomização e os modelos empregados foram validados com alguns dados experimentais.

Os autores ainda comentam que a aplicação destes modelos em um tempo otimizado de injeção de combustível podem proporcionar um choque menor de gotículas nas paredes do cilindro, fazendo com que haja uma melhor distribuição volumétrica, aumentando a turbulência no estágio de máxima compressão e propiciando, um maior poder de queima logo após a ignição. Os autores visualizaram ainda boa concordância dos dados simulados com as observações experimentais, concluindo que a simulação utilizando o modelo de atomização pode ser uma boa aproximação para problemas de motores à combustão interna.

Ainda neste ano, NKONGA (2000) demonstra algumas formas de abordagem dentro do contexto de grids móveis. Neste contexto, ele reformula algumas definições básicas das aproximações conservativas de volumes finitos. Na tentativa de desenvolver esquemas de movimentação espaço-tempo com acurácia, o autor propõe trajetórias suaves através de fórmulas em função das coordenadas geométricas em que o grid se encontra. Estas coordenadas satisfazem as leis de conservação e ainda garantem a

consistência global e estabilidade numérica para tais aproximações.

Utilizando modelos de turbulência RANS,  $k - \varepsilon$  por exemplo, aproximações numéricas com os termos difusivos nos elementos móveis também são exploradas e desenvolvidas. Usando um sistema de equações, o pesquisador propõe um esquema simples de relaxação do grid, porém extremamente robusto. Além de outros estudos de caso em seu trabalho ele ainda apresenta duas geometrias de motores levando em conta o movimento do pistão e das válvulas. Com uma integração temporal de primeira e espacial de segunda ordem o autor consegue demonstrar a eficiência de seu processo de relaxação de grid, mesmo com a complexidade das fronteiras por serem móveis. Ele ainda afirma que seu esquema pode perfeitamente ser eficiente não só neste tipo de aplicação, mas também nos demais tipos apresentados e comentados em seu trabalho.

ABU-ORF e CANT (2000) desenvolveram e validaram um novo modelo de taxa de reação para a combustão em escoamentos turbulentos de pré-misturas aplicado em motores a ignição por faísca. O modelo foi implementado e testado em um código próprio e posteriormente comparado com outro modelo de combustão muito conhecido da literatura, o “*Eddy Break-Up Model*” (EBU). Ainda, diferentemente do EBU e de outros modelos básicos de combustão, este novo modelo não apresenta tendência alguma de produzir taxas de reações excessivamente altas próxima às paredes do domínio. Os autores simularam vários diferentes estudos de caso, padronizando variáveis como rotação do motor e razão de compressão, e variaram o tipo de combustível, os quais destacam-se o isoctano, propano e metano. E por fim, ainda avaliaram variações do ângulo do virabrequim na ativação da ignição na mistura ar/combustível no interior da câmara.

BRINK *et al.* (2000) discutem basicamente as vantagens e limitações do modelo de combustão EBU. Além de explicar sua origem e versatilidade para os mais diversos problemas, os autores avaliam alguns aspectos de sua aplicação, como efeitos de temperatura flutuante na taxa de reação, de como o modelo se comporta com a implantação de cinética química, metodologias para cálculos de chama e mecanismos de reação. Os autores ainda apresentam e comentam alguns exemplos de aplicação e sugerem dicas de implementação e controle de parâmetros para este modelo de combustão.

KODAH *et al.* (2000) descrevem uma simples análise da predição da pressão no interior de um motor à ignição por faísca. Isto foi realizado através da modelagem do

processo de combustão utilizando uma abordagem do tipo função de Wieb, a qual é uma função exponencial e calcula a taxa de combustível queimado no processo. Por seleção de dois simples parâmetros da função da taxa de reação, qualquer motor de ignição por faísca, com quaisquer características geométricas e dimensões, pode ser avaliado por este modelo. Sua validade foi testada e comparada com resultados obtidos com outros estudos de caso em um motor com as mesmas condições operacionais. Os resultados teóricos quando comparados com os experimentais apresentaram boa concordância. Os autores ainda apresentam estudos variando algumas condições operacionais, tais como razão de compressão, rotação do motor e tempo de ignição, por exemplo.

MILTON et al. (2001) apresentam em seu trabalho, o estudo experimental com a mistura ar/combustível em uma válvula de admissão, de um motor à combustão interna, juntamente com os resultados numéricos, obtidos por simulação. Este caso foi estudado experimentalmente através de um protótipo especialmente construído. Este protótipo constitui de um simples cilindro contendo apenas uma válvula. Os autores avaliaram a partir da injeção da mistura, os filmes de combustível na entrada da válvula e no interior do cilindro, e a alta deposição das gotas nesta válvula. A localização do bico injetor, o tamanho da abertura da válvula e a vazão de entrada da mistura influenciam substancialmente na atomização e dispersão do combustível no cilindro. Face a estes experimentos os pesquisadores procuraram reproduzir as observações experimentais simulando-as com o auxílio do pacote computacional FLUENT. Eles modelaram o sistema como monofásico turbulento e atribuíram todas as condições de contorno pertinentes ao problema. Assim, eles apresentam várias figuras referentes aos experimentos e comprovam os fenômenos experimentalmente observados com os dados obtidos por simulação. A principal conclusão dos pesquisadores foi que o pacote computacional pôde representar qualitativamente o comportamento do escoamento no interior do cilindro, mesmo apesar das simulações terem sido realizadas somente com uma fase, ou seja, somente gás em um meio que deveria ser reacional.

YAŞAR (2001) apresenta uma nova abordagem computacional para a dinâmica de ignição para a simulação de motores à combustão interna. Seu modelo computacional resolve equações eletromagnéticas em escala temporal e espacial em conjunto com as equações fundamentais de fluidodinâmica, conhecidas como equações de Navier-Stokes, através da utilização do pacote computacional KIVA-3. As interações entre o gás e a chama na região da ignição são resolvidas numericamente através da troca de quantidade de movimento e energia entre estes dois campos. Resultados mostram

que pequenas variações da corrente de descarga na faísca tem impacto significativo tanto na combustão quanto nas emissões. Por fim, os autores concluem que melhorias na modelagem desta ignição por faísca podem levar a um melhor conhecimento da propagação da chama e futuramente no projeto e dimensionamento de novas velas de ignição para estes motores.

JOHAN et al. (2001) realizaram o trabalho mais completo que esta resenha pôde levantar. Em um artigo relativamente simples e objetivo os autores demonstraram todas as etapas necessárias para a modelagem e simulação de um motor à combustão interna por técnicas de CFD.

Após uma revisão bibliográfica sobre as equações de transporte e alguns conceitos sobre elementos finitos, eles apresentam seu estudo de caso, um cilindro com duas válvulas e funcionamento a quatro estágios. Eles comentam também o modelo de turbulência utilizado, de uma equação, o Spalart-Allmaras (SPALART e ALLMARAS, 1992), além da equação senoidal de movimentação do pistão ao longo do tempo e toda a estratégia de solução, como condições de contorno, condições iniciais para simulação, integração temporal, esquemas de discretização, além de noções de pós-processamento. O pacote computacional responsável pelas simulações foi o SPECTRUM. Suas principais conclusões foram, além do pacote e dos modelos utilizados representarem bem qualitativamente sobre o que se espera de um escoamento no interior de um cilindro, este trabalho foi apenas o início, pois pode-se estender esta simulação, incluindo-se a modelagem da combustão e da chama devido à ignição, a modelagem da atomização do combustível durante a admissão, e a representação real do campo de pressão ao longo do tempo.

# Capítulo 3

## Modelagem Matemática

Este capítulo apresenta uma modelagem matemática a ser utilizada na realização dos experimentos numéricos deste trabalho. Apesar deste capítulo apresentar as equações fundamentais da fluidodinâmica, um enfoque maior será dado para os modelos utilizados e implementados no pacote computacional CFX-TASCflow<sup>TM</sup>. Portanto, apresentam-se todas as equações fundamentais de transporte, as equações da conservação da massa e energia, além da equação de transporte da quantidade de movimento. Comenta-se também a respeito de equações extras para o “fechamento” do modelo, tais como as equações do modelo de turbulência e a equação para uma espécie química qualquer presente no escoamento. Uma ênfase maior será dada para o tratamento compressível destas equações uma vez que o objeto de estudo deste trabalho possui tal característica fenomenológica.

### 3.1 Equações de Conservação

As equações de transporte, equação da continuidade, quantidade de movimento (*momentum*) e energia, as quais fundamentam e regem a fluidodinâmica baseiam-se em três princípios físicos básicos, conforme segue:

- A massa se conserva;
- Segunda Lei de Newton,  $F = m.a$  ;
- A energia se conserva.

Estes três princípios fundamentais, de forma análoga, podem ser trabalhados através de balanços em volumes de controle infinitesimais, de forma a obter-se a respectiva equação de transporte para cada princípio físico. Tais equações, depois de obtidas, podem ser usadas para representar escoamentos tanto em regime laminar quanto em regime turbulento, em virtude deste último ser de natureza caótica (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995). Entretanto, não é comum, para propósitos de cálculos na engenharia, resolver estas equações na forma em que são apresentadas, pelo simples fato da tecnologia atual não resolvê-las com acurácia e tempo computacional satisfatórios. Assim, comumente é introduzido o conceito de decomposição em propriedades médias, sendo mais comum o procedimento convencional de médias temporais para escoamentos incompressíveis, nos quais a massa específica é constante em todo o domínio, e o procedimento médias mássicas ponderadas para o cálculo de escoamentos compressíveis, nos quais a massa específica é função de uma equação de estado.

Estas equações de transporte em questão serão comentadas nas seções seguintes desta dissertação.

## 3.2 Procedimentos de Decomposição

Conforme comentado anteriormente, a necessidade da introdução do cálculo das propriedades médias foram primeiramente discutidos por CEBECI e SMITH (1974), os quais destacam o procedimento convencional de médias temporais, também conhecido como decomposição de *Reynolds*, e o procedimento médias mássicas ponderadas. Neste trabalho comentar-se-á ambos procedimentos.

Para uma grandeza qualquer  $\phi$  (vetor velocidade  $U_i$ , pressão  $P$ , massa específica  $\rho$ ) a decomposição entre uma parcela conhecida e uma parcela flutuante pode ser escrita como

$$\underbrace{\phi(x_i, t)}_{\text{Valor Instantâneo}} = \underbrace{\langle \phi(x_i, t) \rangle}_{\text{Parcela Conhecida}} + \underbrace{\varphi(x_i, t)^*}_{\text{Flutuação}} \quad \text{com } \langle \varphi^* \rangle = 0 \quad (3.1)$$

$t$  é o tempo e  $x_i$  a direção espacial. A parcela conhecida da equação (3.1) pode ser obtida utilizando um procedimento de média conjuntural da forma:

$$\langle \phi(x_i, t) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N W \phi(x_i, t)_n, \quad (3.2)$$

em que  $N$  é o número de conjuntos e  $W$  denota uma função de ponderação. Em casos específicos, como escoamentos em regime permanente, o termo  $\langle \phi(x_i, t) \rangle$  também

pode ser obtido utilizando um procedimento de média temporal:

$$\langle \phi(x_i) \rangle = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} W \phi(x_i, t) dt. \quad (3.3)$$

Nas seções seguintes deste documento nenhuma distinção será feita entre a média conjuntural e a temporal, já que esta distinção não tem influência alguma na forma resultante das equações de conservação. Para obterem-se as equações médias, o procedimento mais comum é substituir as parcelas conhecida e flutuante por um valor instantâneo nas equações de fluxo e calcular a média destas equações resultantes. Uma vez calculada a média dos termos não-lineares destas equações, novos termos surgem, que nada mais são além de correlações entre os diferentes valores das grandezas flutuantes.

### 3.2.1 Médias Temporais

Atribuindo um fator de ponderação nas equações (3.2) e (3.3) como unitário,

$$W = 1$$

resulta no procedimento convencional no cálculo das médias temporais, utilizado principalmente para escoamentos incompressíveis. Para este caso, a equação (3.1) é escrita como

$$\phi = \bar{\phi} + \varphi'' \quad \text{com} \quad \overline{\varphi''} = 0. \quad (3.4)$$

Utilizando as seguintes nomenclaturas, correspondentes à equação (3.1):

$$\bar{\phi} \simeq \langle \dots \rangle \quad (\text{Valor conhecido no cálculo das médias temporais})$$

$$\varphi'' \simeq \varphi^* \quad (\text{Valor flutuante no cálculo das médias temporais})$$

Considerando duas grandezas quaisquer,  $A$  e  $B$ , as seguintes regras podem ser aplicadas:

$$\overline{\bar{A}} = \bar{A} \quad (3.5)$$

$$\overline{A + B} = \bar{A} + \bar{B} \quad (3.6)$$

$$\overline{\overline{Ab'}} = 0 \quad (3.7)$$

$$\overline{Ab'} = \overline{(\overline{A} + a'')b''} = \overline{\overline{A}b''} + \overline{a''b''} = \overline{a''b''} \quad (3.8)$$

$$\overline{AB} = \overline{(\overline{A} + a'')(\overline{B} + b'')} = \overline{A\overline{B}} + \overline{a''b''} \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial^n \overline{A}}{\partial x^n} = \frac{\partial^n \overline{A}}{\partial x^n} \quad (3.10)$$

Estas regras podem ser aplicadas na derivação e simplificação das equações de conservação nas seções seguintes. Como pode ser visualizado na equação (3.6), a média da soma das duas grandezas equivalem-se a soma de cada uma de suas médias  $\overline{A}$  e  $\overline{B}$ . Ainda a média da n-ésima derivada resulta na derivada n-ésima da média da própria quantidade, equação (3.10). Somente as combinações não-lineares nas equações (3.8) e (3.9) resultam em novas e desconhecidas correlações entre as parcelas flutuantes.

### 3.2.2 Médias Mássicas Ponderadas

Em uma equação de transporte típica para uma variável  $\phi$ , a conservação pode somente ser obtida para a propriedade extensiva correspondente,  $\rho\phi$ . Para uma massa específica não-constante,  $\rho$ , resulta em uma combinação não-linear e o cálculo de médias temporais leva a uma nova e desconhecida correlação  $\overline{\rho'\phi'}$ , análoga à equação (3.9). Para evitar este fato o cálculo de médias ponderadas é utilizado, simplesmente atribuindo um fator de ponderação  $W$  nas equações (3.2) e (3.3) conforme segue

$$W = \frac{\rho}{\bar{\rho}}. \quad (3.11)$$

Com a decomposição em uma parcela conhecida e outra parcela flutuante, a equação (3.1) pode ser escrita como

$$\phi = \frac{\rho\phi}{\bar{\rho}} + \varphi' = \tilde{\phi} + \varphi' \quad \text{com} \quad \tilde{\varphi}' = \frac{\rho\varphi'}{\bar{\rho}} = 0, \quad (3.12)$$

utilizando as seguintes nomenclaturas, correspondentes à equação (3.1):

$$\tilde{\phi} \simeq \langle \dots \rangle \quad (\text{Parcela conhecida no cálculo das médias ponderadas})$$

$$\varphi' \simeq \varphi^* \quad (\text{Parcela flutuante no cálculo das médias ponderadas})$$

As regras para o cálculo das médias temporais também valem para o cálculo das médias ponderadas, ou seja, as regras a partir das equações (3.5 - 3.10) são aplicadas para este caso.

### 3.2.3 Relação entre Médias Temporais e Ponderadas

Há casos em que é necessário conhecer a relação entre as médias temporais e ponderadas para uma determinada grandeza. A partir da parcela conhecida da média temporal da equação (3.12), uma relação entre  $\tilde{\phi}$  e  $\bar{\phi}$  pode ser derivada:

$$\bar{\phi} = \overline{\tilde{\phi} + \varphi'} \quad \rightarrow \quad \tilde{\phi} - \bar{\phi} = -\overline{\varphi'}. \quad (3.13)$$

Usando a mesma equação, o valor média temporal  $\overline{\varphi'}$  pode ser escrito conforme segue:

$$\overline{\rho\varphi'} = 0 \quad \rightarrow \quad \overline{(\bar{\rho} + \rho'')\varphi'} = 0 \quad \rightarrow \quad \overline{\varphi'} = -\frac{\overline{\rho''\varphi'}}{\bar{\rho}}, \quad (3.14)$$

e a equação (3.13) fica:

$$\tilde{\phi} - \bar{\phi} = \frac{\overline{\rho''\varphi'}}{\bar{\rho}}. \quad (3.15)$$

Utilizando a relação

$$\tilde{\phi} + \varphi' = \bar{\phi} + \varphi'', \quad (3.16)$$

e multiplicando esta equação por  $\rho$  e fazendo a média temporal da equação resultante, outra relação entre  $\tilde{\phi}$  e  $\bar{\phi}$  pode ser derivada, a qual contém somente valores flutuantes a partir de médias temporais:

$$\tilde{\phi} - \bar{\phi} = \frac{\overline{\rho''\varphi''}}{\bar{\rho}}. \quad (3.17)$$

Nota-se a partir das equações (3.15) e (3.17), a diferença entre ambos valores médios,  $\bar{\phi}$  e  $\tilde{\phi}$ , dependem das correlações  $\overline{\rho''\varphi'}$  ou  $\overline{\rho''\varphi''}$ .

## 3.3 Conservação da Massa

A equação que representa a conservação da massa, também conhecida como equação da continuidade, pode ser obtida analisando a taxa mássica de escoamento que entra e sai de um determinado elemento infinitesimal de volume:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0. \quad (3.18)$$

Nesta equação,  $U_j$  representa o vetor velocidade do escoamento. Considerando um volume de controle infinitesimal, o acréscimo ou decréscimo temporal da massa específica neste volume é controlado pelo transporte convectivo de massa sobre as fronteiras deste volume de controle.

De forma a obter a formulação média da equação (3.18), deriva-se a equação da continuidade na forma adequada para escoamentos compressíveis ( $\rho \neq \text{constante}$ ), isto é introduzindo o conceito de médias mássicas ponderadas, resultando na seguinte relação:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \widetilde{U}_j) = 0. \quad (3.19)$$

Nenhuma distinção é feita entre escoamentos de baixa e alta compressibilidade para este princípio de conservação.

### 3.4 Transporte da Quantidade de Movimento

A equação de transporte da quantidade de movimento,  $\rho U_i$ , pode ser formulada como segue:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_i U_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho f_i. \quad (3.20)$$

Os três termos no lado direito da equação (3.20) representam os  $x_i$ -componentes das forças devido a pressão,  $P$ , o tensor tensão viscoso,  $\tau_{ij}$ , e as forças de corpo,  $f_i$ , respectivamente. Na derivação seguinte das equações médias, as força de corpo serão negligenciadas. Assim, para um fluido hipotético newtoniano, o tensor tensão é dado por:

$$\tau_{ij} = -\mu_b \delta_{ij} \frac{\partial U_l}{\partial x_l} - \mu \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.21)$$

em que  $\mu_b = 2/3\mu$  é a viscosidade *bulk*,  $\mu$  é a viscosidade molecular e  $\delta_{ij}$  representa o delta de Kronecker ( $\delta_{ij} = 1$  para  $i = j$  e  $\delta_{ij} = 0$  para  $i \neq j$ ).

Efeitos das forças de corpo são importantes quando modelam-se escoamentos com meios porosos, em que um termo fonte na equação do *momentum* deve ser incluído. Ainda, para escoamentos em que efeitos da coriólise e força centrípeta são relevantes, também existe uma contribuição destas forças em  $f_i$ , casos estes que não existem neste trabalho.

Adotando a formulação compressível para esta equação fundamental de transporte, equação (3.20), obtem-se a seguinte equação, equação (3.22), a qual é muito próxima a sua formulação incompressível, equação (3.23), apresentada aqui em sua forma final:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_i \tilde{U}_j) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} + \overline{\rho u'_i u'_j}) \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{U}_i \bar{U}_j) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} + \rho \overline{u''_i u''_j}) . \quad (3.23)$$

Pela forma não-linear do termo convectivo, segundo termo do lado esquerdo da equação (3.20), o termo  $\overline{\rho u'_i u'_j}$  resulta da aplicação de uma média e representa o efeito da turbulência no escoamento. Matematicamente este termo é um tensor de segunda ordem, contém nove elementos e age como uma tensão. Este tensor é conhecido como *tensor tensão de Reynolds*.

A média da tensão viscosa fica como:

$$\bar{\tau}_{ij} = -\overline{\mu_b \delta_{ij} \frac{\partial U_l}{\partial x_l}} - \mu \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.24)$$

Para escoamentos compressíveis de baixa velocidade, o produto da viscosidade *bulk*,  $\mu_b$ , e a derivada  $\partial U_l / \partial x_l$  é pequeno comparado com outros termos da tensão, e assim podem ser negligenciados. As correlações entre as flutuações da viscosidade e os gradientes de velocidade também podem ser negligenciados para escoamentos a baixas velocidades. Por conseguinte, a equação (3.24) pode ser reduzida a:

$$\bar{\tau}_{ij} \approx -\bar{\mu} \left( \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.25)$$

### 3.5 Conservação da Energia

Além da massa e do *momentum*, a energia é a terceira propriedade do fluido a qual uma equação deve ser formulada de forma a descrever quaisquer tipos de escoamento. A formulação apresentada aqui da equação da energia é em função da entalpia total,  $H$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho H) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j H) = \frac{\partial P}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} (U_i \tau_{ij} + Q_j) + \rho U_i f_i. \quad (3.26)$$

Considerando um volume de controle infinitesimal, os dois termos do lado esquerdo desta equação descrevem a taxa de aumento de  $H$  e a taxa a qual esta

grandeza é transportada por convecção nas fronteiras do volume de controle. O primeiro termo do lado direito da equação descreve a influência da pressão na entalpia total. O segundo termo descreve a taxa de trabalho realizado pelo fluido contra sua tensão viscosa produzida por deformação. O gradiente  $Q_j$  é o fluxo de energia transferido por condução no volume de controle e o último termo refere-se ao trabalho realizado por forças de corpo. Este último termo é negligenciado na derivação da equação média da conservação de energia.

A entalpia total é relacionada a energia total,  $E$ , energia interna,  $e$ , e entalpia estática,  $h$ , como:

$$H = E + \frac{P}{\rho} = e + \frac{1}{2}U_i U_i + \frac{P}{\rho}$$

$$H = h + \frac{1}{2}U_i U_i$$

Para derivação futura das equações de transporte para fluxos turbulentos de calor, é interessante expressar a equação de energia em termos da entalpia estática;

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j h) = \frac{\partial P}{\partial t} + U_j \frac{\partial P}{\partial x_j} - \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{\partial Q_j}{\partial x_j}. \quad (3.27)$$

Em seguida, aplicando a Lei de Fourier, um fluxo de calor,  $Q_j$ , nos lados direitos das equações (3.26) e (3.27) resulta em

$$Q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad (3.28)$$

em que  $\lambda$  é a condutividade térmica. Uma relação deve ser encontrada, de forma que a entalpia relacione-se com a temperatura. Assim, para um gás ideal,  $h$  é diretamente relacionado com  $T$  através do calor específico à pressão constante,  $c_P$ :

$$h = c_P T. \quad (3.29)$$

Se a razão entre a variação da pressão e a pressão absoluta é pequena comparada com a razão entre a variação da temperatura e a temperatura absoluta, a lei dos gases ideais,  $P = \rho RT$ , mostra que o efeito da mudança da pressão na temperatura é pequeno. Isto acontece em escoamentos incompressíveis e compressíveis a baixas velocidades. Ainda nestes casos, a dissipação será muito pequena (CEBECI e SMITH, 1974); Portanto, os termos relacionados à dissipação e a pressão nas equações (3.26)

e (3.27) podem ser negligenciados levando à formulação da equação da energia para escoamentos compressíveis a baixas velocidades e incompressíveis, respectivamente:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho H) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j H) = -\frac{\partial Q_j}{\partial x_j} \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j h) = -\frac{\partial Q_j}{\partial x_j} \quad (3.31)$$

### 3.5.1 Forma Compressível para Baixas Velocidades

Aplicando o conceito das médias mássicas ponderadas nas equações (3.30) e (3.31), resultam nas seguintes equações para as entalpias total e estática:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{H}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{H}) = -\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{Q}_j + \overline{\rho u'_j H'}) \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{h}) = -\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{Q}_j + \overline{\rho u'_j h'}) \quad (3.33)$$

As definições para a média mássica ponderada da entalpia e a entalpia flutuante são apresentadas a seguir:

$$\tilde{H} = \tilde{h} + \frac{\overline{U_i U_i}}{2} = \tilde{h} + \frac{\tilde{U}_i \tilde{U}_i}{2} + \frac{\overline{\rho u'_i u'_i}}{2\bar{\rho}} = \tilde{h} + \frac{\tilde{U}_i \tilde{U}_i}{2} + k \quad (3.34)$$

$$H' = h' + \tilde{U}_i u'_i + \frac{u'_i u'_i}{2} - k \quad (3.35)$$

em que  $k = \overline{u'_i u'_i}/2$  representa a energia cinética turbulenta.

### 3.5.2 Forma Compressível para Altas Velocidades

Aplicando o conceito das médias mássicas ponderadas nas equações (3.26) e (3.27), resultam nas seguintes equações para a entalpia total e estática:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{H}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{H}) = \frac{\partial \bar{P}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{U}_i \bar{\tau}_{ij} + \overline{u'_i \tau_{ij}} + \bar{Q}_j + \overline{\rho u'_j H'}) \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{U}_j \tilde{h}) &= \frac{\partial \bar{P}}{\partial t} + \overline{U_j \frac{\partial P}{\partial x_j}} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{Q}_j + \overline{\rho u'_j h'}) - \overline{\tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j}} \end{aligned} \quad (3.37)$$

Para a formulação de escoamentos à altas velocidades, os termos do trabalho realizado pela pressão e da dissipação não podem ser negligenciados. Isto leva a uma

equação complexa para a conservação de energia. A média temporal do produto de duas grandezas, sendo uma a partir do conceito de média temporal e outra do conceito de média mássica ponderada, não pode ser automaticamente substituído pelo produto dos valores conhecidos e pelo produto média temporal de suas flutuações:

$$\overline{U_i \tau_{ij}} = \tilde{U}_i \overline{\tau_{ij}} + \overline{u'_i \tau_{ij}} \neq \tilde{U}_i \overline{\tau_{ij}} + \overline{u'_i \tau'_{ij}}. \quad (3.38)$$

As definições da média mássica ponderada da entalpia,  $\tilde{H}$ , e a flutuação da entalpia,  $H'$  são similares para o escoamento compressível para baixas velocidades, ver seção 3.5.1.

## 3.6 Modelos de Turbulência

Conforme comentado na seção 3.1, as equações de conservação, principalmente a equação do *momentum*, são modificadas de forma a contar com os efeitos turbulentos. A literatura apresenta basicamente duas grandes classes de modelos de turbulência, os modelos baseados na hipótese de Boussinesq, também conhecidos como modelos de viscosidade *Eddy* os quais apresentam comportamento isotrópico dos tensores de Reynolds, como por exemplo os modelos  $k-\varepsilon$  padrão (LAUNDER e SPALDING, 1974),  $k-\omega$  (WILCOX, 1986), entre outros. Há também os modelos de segunda ordem, os quais apresentam comportamento anisotrópico destes tensores, havendo a necessidade de calculá-los ao longo da simulação, acarretando em um maior esforço computacional e possíveis problemas de convergência. Um modelo bastante conhecido desta classe é o RSM (*Reynolds Stress Model*) desenvolvido originalmente por CLARKE e WILKES (1989).

Neste trabalho, especificamente, trabalhar-se-á com o modelo  $k-\varepsilon$  padrão, porque a grande maioria dos trabalhos numéricos relacionados à motores utilizam este modelo de turbulência. Será apresentada, de uma forma sucinta, suas equações de transporte dentro da formulação compressível, bem como todas as propriedades pertinentes a este modelo de turbulência.

Como comentado anteriormente, o modelo  $k-\varepsilon$ , assim como outros que utilizam a viscosidade *Eddy*, relaciona o tensor de Reynolds com variáveis conhecidas do escoamento. Por exemplo, este tensor de Reynolds, na equação do *momentum*, para escoamentos incompressíveis, é apresentado conforme a seguir, último termo do lado

direito da equação (3.23):

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = -\mu_t \left( \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \rho \delta_{ij} k \quad (3.39)$$

A equação (3.39) pode somente expressar os termos de flutuação turbulenta como função de variáveis conhecidas, se a energia cinética turbulenta,  $k$ , e a viscosidade turbulenta,  $\mu_t$ , também forem conhecidas. O modelo de turbulência  $k - \varepsilon$  fornece tais variáveis.

### 3.6.1 Adequação das Equações de Conservação

Com a idéia inicial da abordagem da viscosidade *Eddy* para os modelos de turbulência desta classe, a forma final das equações de conservação podem ser alcançadas. Uma vez que todas as variáveis são quantidades conhecidas do escoamento, é comum desprezarem-se as notações de sobrescritos, médias temporais e médias mássicas ponderadas. Entretanto, algumas destas variáveis ainda terão definições diferentes dependendo do escoamento ser compressível ou não. Esta é uma distinção que geralmente não tem importância nos cálculos numéricos, mas que tem papel crucial no entendimento e interpretação das variáveis calculadas.

#### Continuidade

A equação de conservação da massa torna-se,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \overline{U}_j) = 0$$

Lembrando que para escoamentos compressíveis, a massa específica é uma média temporal e a velocidade é uma média mássica ponderada.

#### Momentum

A equação de transporte da quantidade de movimento fica,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \overline{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \overline{U}_j \overline{U}_i) \\ = -\frac{\partial P^*}{\partial x_i} + f_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu_{cf} \left( \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_{cf} \frac{\partial \overline{U}_l}{\partial x_l} \delta_{ij} \right\} \end{aligned} \quad (3.40)$$

em que,

$$\mu_{cf} = \mu + \mu_t$$

A interpretação acerca da massa específica e velocidade é a mesma da equação da continuidade. O termo fonte e a pressão são sempre médias temporais, mas nota-se que o termo  $\frac{2}{3}\rho\delta_{ij}k$ , do modelo de viscosidade *Eddy* do tensor de Reynolds, é agrupado com a pressão pelo fato deste termo ser escalar. Por conseguinte, para se obter a pressão termodinâmica, subtrai-se o termo  $\frac{2}{3}\rho\delta_{ij}k$  da pressão calculada,  $P^*$  a partir da equação (3.40). A forma padrão do tensor tensão efetivo exclui a porção devido ao gradiente de velocidade.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\bar{U}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\bar{U}_j\bar{U}_i) = -\frac{\partial P^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu_{cf} \left( \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) \right\} + f_i$$

Isto é consistente com a forma padrão do tensor de Reynolds utilizado no modelo de turbulência.

## Energia

No caso da conservação da energia, a partir dos conceitos anteriores do modelo de turbulência, a equação de conservação total da energia torna-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho H) - \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\bar{U}_j H) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + S_E \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \bar{U}_i \left[ \mu_{cf} \left( \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3}\mu_{cf} \frac{\partial \bar{U}_l}{\partial x_l} \delta_{ij} \right] + \mu \frac{\partial k}{\partial x_j} \right\} \end{aligned} \quad (3.41)$$

em que  $Pr_t$  é o número de Prandtl turbulento,  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta e os termos  $H = h + \frac{1}{2}\bar{U}_i\bar{U}_i + k$  e  $\frac{2}{3}\rho\delta_{ij}k$  são agrupados com a parcela da pressão na entalpia estática, antes dos termos modelados serem introduzidos nas equações de conservação.

### 3.6.2 Modelo $k - \varepsilon$ Padrão

O modelo de turbulência  $k - \varepsilon$  fornece estas variáveis a partir da solução de duas equações de transporte, uma para  $k$  e outra para  $\varepsilon$ , para então calcular a viscosidade turbulenta. A primeira derivação deste modelo foi feita para escoamentos incompressíveis, nos quais as flutuações da massa específica podem ser ignoradas. A mesma formulação é utilizada para escoamentos compressíveis, com a exceção de um termo que possui formulação distinta para este tipo de escoamento.

A viscosidade turbulenta,  $\mu_t$ , é modelada como o produto de uma escala turbulenta de velocidade,  $V_t$ , e um comprimento de escala turbulenta,  $\ell_t$ , conforme proposto por Prandtl e Kolmogorov. Introduzindo uma constante de proporcionalidade tem-se

$$\mu_t = \rho c_\mu \ell_t V_t \quad (3.42)$$

A escala de velocidade turbulenta é igual a raiz quadrada da energia cinética turbulenta,  $k$ , a qual é determinada via equação de transporte:

$$V_t = \sqrt{k} \quad (3.43)$$

No modelo de duas equações  $k - \varepsilon$  assume-se que o comprimento de escala é um comprimento de escala de dissipação, e quando as escalas dissipativas turbulentas são isotrópicas, Kolmogorov determinou que

$$\varepsilon = \frac{k^{3/2}}{\ell_t} \quad (3.44)$$

e  $\varepsilon$  é a taxa de dissipação turbulenta da energia cinética. Caso  $k$ ,  $\varepsilon$  ou  $\ell_t$  sejam conhecidos, a viscosidade turbulenta é determinada a partir da equação (3.42) e os tensores de Reynolds podem ser calculados a partir da equação (3.39), fechando assim as equações turbulentas do *momentum*. A tarefa restante é determinar equações para  $k$  e  $\varepsilon$  e condições de contorno apropriadas.

Portanto, a viscosidade *Eddy*,  $\mu_t$ , é calculada a partir do produto de uma escala turbulenta de velocidade e um comprimento de escala turbulenta, como segue:

$$\mu_t = \rho c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.45)$$

em que  $\varepsilon$  é a taxa de dissipação de  $k$  (o montante de  $k$  por massa e tempo convertidos em energia interna de fluido por ação viscosa) e  $c_\mu$  é uma constante do modelo.

Finalmente, apresentam-se ambas equações de transporte deste modelo para obtenção local dos valores de  $k$  e  $\varepsilon$ :

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{U}_j k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + P_k - \rho \varepsilon \quad (3.46)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{U}_j \varepsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_\varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + \frac{\varepsilon}{k} (c_{\varepsilon 1} P_k - \rho c_{\varepsilon 2} \varepsilon) \quad (3.47)$$

em que os coeficientes difusivos são dados por

$$\Gamma_k = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}$$

$$\Gamma_\varepsilon = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}$$

As constantes pertinentes a este modelo de turbulência são visualizadas a partir da Tabela 3.1. A taxa de produção da energia cinética turbulenta,  $P_k$ , é dada por

$$P_k = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} \quad (3.48)$$

Substituindo o tensor de Reynolds compressível, equação (3.39), na equação de  $P_k$  leva a:

$$P_k = \mu_t \left( \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \left( \rho k + \mu_t \frac{\partial \overline{U}_l}{\partial x_l} \right) \frac{\partial \overline{U}_k}{\partial x_k} \quad (3.49)$$

Portanto, este é o termo de produção de energia cinética turbulenta para escoamentos compressíveis. Este termo é aproximadamente igual ao  $P_k$  válido para escoamentos incompressíveis, a maior diferença entre ambos ocorrerá em regiões onde altos gradientes de velocidade são observados. Assim, o  $P_k$  matematicamente válido e correspondente para escoamentos incompressíveis, a partir da equação 3.49 reduz-se a:

$$P_k = \mu_t \left( \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \overline{U}_i}{\partial x_j} \quad (3.50)$$

$c_\mu$	$c_{\varepsilon 1}$	$c_{\varepsilon 2}$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$	$Pr_t$
0.09	1.44	1.92	1.0	1.3	0.9

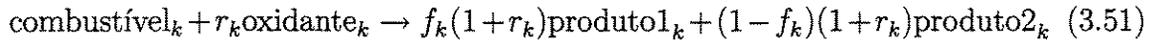
Tabela 3.1: Constantes do Modelo  $k - \varepsilon$  Padrão

### 3.7 Modelos de Combustão

Em quase todos os processos de combustão nos quais um combustível e um oxidante são convertidos a produtos, várias etapas cinéticas são envolvidas. Uma chama de metano, por exemplo, requer mais de 200 reações diferentes para descrever sua cinética química detalhada. Na maioria das reações acontecem formação e subsequente destruição de espécies químicas intermediárias as quais não existem na zona da chama. Entretanto, estas espécies são importantes para descrever o comportamento preciso e particular da queima quando estudam-se problemas característicos de combustão.

Manipular mais de 200 reações em códigos computacionais de CFD não é atrativo em virtude da atual tecnologia. Muitas características importantes de uma chama podem ser modeladas usando uma quantidade reduzida de reações, incluindo perdas de calor, consumo de oxigênio e qualidade da queima.

O código computacional a ser usado neste trabalho, CFX-TASCflow<sup>TM</sup>, tem a capacidade de resolver escoamentos reactantes ou com combustão usando o Modelo de Dissipação Eddy (EDM) desenvolvido originalmente por MAGNUSSEN e HJERTAGER (1976). Da maneira que está implementado o modelo, um processo de combustão pode ser descrito usando uma simples reação da seguinte forma:



Acima,  $r_k$  é a massa estequiométrica da  $k$ -ésima reação e  $f_k$  é a fração mássica do primeiro produto formado na reação (massa do primeiro produto / massa total de produtos). Por exemplo, para uma reação genérica na forma:



Para a reação acima:

$$f_{(3.52)} = \frac{c.PM_C}{c.PM_C + d.PM_D}$$

e

$$r_{(3.52)} = \frac{b.PM_B}{a.PM_A}$$

em que  $PM_i$  é o peso molecular da espécie química  $i$ .

### 3.7.1 Equação de Transporte das Espécies Químicas

Face aos conceitos empregados, uma equação de transporte extra é resolvida para cada espécie química no modelo. A equação é em função de  $Y_i$ , a fração mássica da espécie química  $i$ , e é apresentada em sua forma final conforme a seguir:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j Y_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_{i,cf} \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) + R_i \quad (3.53)$$

em que

$$\Gamma_{i,cf} = \Gamma_i + \frac{\mu_t}{Sc_t} \quad (3.54)$$

$\Gamma_i$  é a difusividade da espécie química  $i$  e  $Sc_t$  é o número de Schmidt turbulento. A equação (3.53) é simplesmente uma equação geral convectiva-difusiva escrita da mesma forma em que são resolvidas as demais variáveis dependentes do escoamento. Assim, é conveniente resolver em função de  $Y_i$  afim de estabelecer a composição da mistura.

### 3.7.2 Modelo de Dissipação Eddy

A taxa de qualquer reação pode ser limitada pela sua cinética ou pela sua mistura física. Enquanto a mistura física descreve o processo de geração de uma mistura homogênea dos reagentes em um nível molecular, a cinética descreve a taxa a qual as moléculas colidem com energia grande o suficiente para reagirem. Ambos processos são essenciais para ocorrer a reação e qualquer um deles pode controlar o progresso global da reação. Assim, o mais lento entre o processo de mistura e mecanismo cinético é assumido como determinante da taxa de reação.

A taxa de mistura é determinada a partir do EDM, de acordo com a seguinte expressão:

$$R_{k,edm} = -A_{ebu}\rho\frac{\varepsilon}{k}\mathbf{min}\left\{Y_f, \frac{Y_o}{r_k}, B_{ebu}\frac{Y_p}{1+r_f}\right\} \quad (3.55)$$

$Y_f$ ,  $Y_o$  e  $Y_p$  são as frações mássicas do combustível, oxidante e produto, respectivamente. Os parâmetros  $A_{ebu}$  e  $B_{ebu}$  são constantes empíricas do modelo. Nota-se que esta taxa de reação é função de propriedades do fluido como a massa específica, e parâmetros turbulentos, como o  $k$  e  $\varepsilon$ . Portanto, este modelo de combustão, EDM, restringe-se apenas a escoamentos turbulentos.

A taxa de transformação cinética de qualquer espécie química em uma reação é geralmente descrita por uma expressão de Arrhenius, envolvendo uma dependência exponencial para a temperatura e uma dependência que obedece a uma lei de potência (*Power Law*) para as concentrações das espécies químicas reagentes:

$$R_{k,cin} = -A_c T^\beta [C_A]^n [C_B]^m \exp\left(-\frac{E_T}{T}\right) \quad (3.56)$$

em que  $A_c$  é um fator pré-exponencial,  $\beta$  é um expoente da temperatura,  $C_A$  e  $C_B$  são as concentrações dos reagentes  $A$  e  $B$ , e  $E_t$  é a temperatura de ativação da reação.

Há ainda outras formas que podem ser apropriadas para controlar a reação. Por exemplo, é comum haver dependência da concentração para as espécies gasosas ao

invés das demais espécies envolvidas na reação. Entretanto, o modelo EDM utiliza-se de ambas expressões de taxa de reação, equações (3.55) e (3.56). Conseqüentemente, a taxa de reação é determinada entre o mínimo da mistura em nível molecular e a taxa cinética:

$$R_k = \min [R_{k,edm}, R_{k,cin}] \quad (3.57)$$

### 3.7.3 Modificação da Equação da Energia

Para contar com os efeitos térmicos da reação, à equação da energia deve ser adicionada um termo de calor de reação, um termo fonte, e outro relativo às difusividades das espécies químicas presentes. A equação em questão está em sua forma final e é apresentada a seguir:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho H) - \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j H) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_i^n \Gamma_i h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) \\ + S_E - \sum_i h_i^f R_i \end{aligned} \quad (3.58)$$

O termo  $\sum_i h_i^f R_i$  refere-se à contribuição energética provinda da reação química e  $h_i^f$  é entalpia de formação da espécie química  $i$ , este termo transforma a energia de conversões químicas em calor sensível, enquanto o termo  $\sum_i^n \Gamma_i h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_j}$  refere-se à contribuição difusiva das espécies químicas na equação da energia.

# Capítulo 4

## Métodos Numéricos

O método dos volumes finitos foi amplamente utilizado durante os últimos anos para a solução de problemas da fluidodinâmica computacional. No que se refere a material bibliográfico a respeito deste método, destacam-se os seguintes artigos: PATANKAR e SPALDING (1972) e RAITHYBY e SCHNEIDER (1979), além do livro de PATANKAR (1980), entre outros.

O objetivo principal deste capítulo é apresentar de uma maneira sucinta as particularidades dos métodos numéricos utilizados pelo pacote CFX-TASCflow<sup>TM</sup>. Então, neste sentido, o enfoque será centrado na obtenção das equações de discretização, dos esquemas de interpolação implementados e mais utilizados neste trabalho, além de uma breve seção de como os efeitos compressíveis são tratados pelo código computacional.

O CFX-TASCflow<sup>TM</sup> utiliza do método dos volumes finitos (MVF), porém possui abordagem em elementos finitos para representação da geometria. Assim, o código aproveita as flexibilidades geométricas do método dos elementos finitos, assim como as importantes propriedades conservativas do método dos volumes finitos. De acordo com as equações fundamentais de transporte:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho U_j = 0 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho U_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho U_j U_i = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu_{cf} \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right] + S_{U_i} \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \phi + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho U_j \phi = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \Gamma_{cf} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) \right] + S_\phi \quad (4.3)$$

em que  $\rho$  é a massa específica do fluido,  $t$  é o tempo,  $U_j$  é o vetor velocidade,  $x_j$  é a componente espacial em coordenadas cartesianas,  $P$  é a pressão,  $\mu_{cf}$  é a viscosidade

efetiva do fluido,  $\phi$  é um escalar qualquer,  $\Gamma_{cf}$  é a difusividade efetiva do escalar e  $S$  é o termo fonte.

## 4.1 MVF com Base em Elementos Finitos

As equações (4.1) e (4.2) são as equações da continuidade e quantidade de movimento, respectivamente. A equação da energia foi substituída por uma equação de transporte para um escalar genérico, equação (4.3). O método dos volumes finitos (MVF) consiste em integrar estas equações sobre um volume de controle fixo no espaço. Assim, utilizando o teorema de Gauss e integrando a equação (4.3), tem-se,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_v \rho \phi dv + \int_s \rho U_j \phi dn_j = \int_s \Gamma_{cf} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) dn_j + \int_v S_\phi dv \quad (4.4)$$

na equação acima, os índices  $v$  e  $s$  denotam integrais de volume e de superfície, respectivamente, e  $dn_i$  são os componentes diferenciais cartesianos do vetor normal às superfícies do volume de controle. As integrais de superfície são integrações dos fluxos das quantidades conservadas, enquanto que as integrais de volume representam os termos fonte ou termos de acúmulo.

O que define um volume de controle é um aspecto importante para a implementação do método dos volumes finitos. O domínio computacional é discretizado em elementos de fluxo e as superfícies destes volumes de controle são definidos pelos planos medianos de cada elemento.

Esta abordagem tem sido utilizada por vários pesquisadores desta área, como RONEL e BALIGA (1979) e SCHNEIDER e RAW (1986, 1987). Este procedimento cria um volume de controle para cada nó com a fronteira definida por oito segmentos em linha, para duas dimensões, e 24 superfícies quadriláteras para três dimensões. Este arranjo em duas dimensões é apresentado na Figura 4.1.

A equação integrada, equação (4.4), é aplicada para cada volume de controle discretizado por esta técnica. As integrações no volume são relativamente fáceis de converter em uma forma discreta, como será apresentada logo abaixo. As integrações de superfícies são mais envolventes e são convertidas a uma forma discreta, avaliando-as pelos seus pontos de integração. Os locais destes pontos de integração para um elemento de fluxo são apresentados na Figura 4.2 em um elemento bidimensional quadrilátero.

De maneira análoga, para um elemento tridimensional, um elemento de fluxo possui oito octantes e 12 pontos de integração nas superfícies, conforme visualizado na

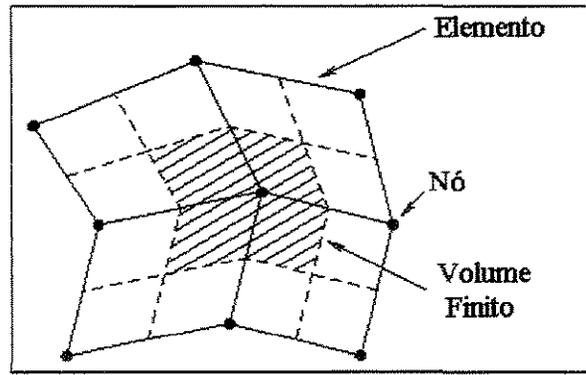


Figura 4.1: Definição de um volume de controle bidimensional.

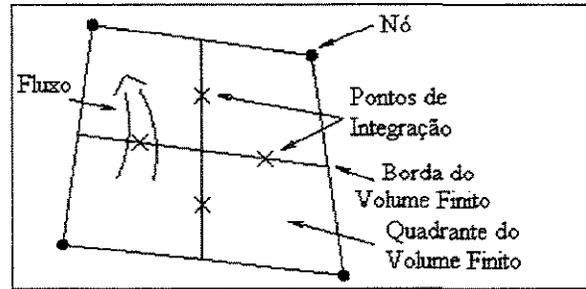


Figura 4.2: Definição dos pontos de integração para um elemento 2-D quadrilátero.

Figura 4.3.

Assim, a forma discreta da equação (4.4) é escrita na forma:

$$\rho Vol \left( \frac{\phi - \phi^o}{\Delta t} \right) + \sum_{ip} \dot{m}_{ip} \phi_{ip} = \sum_{ip} \left( \Gamma_{cf} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \Delta n_j \right)_{ip} + \bar{S}_\phi Vol \quad (4.5)$$

em que

$$\dot{m}_{ip} = (\rho U_j \Delta n_j)_{ip}^o$$

e  $Vol$  é o volume total deste volume de controle. O subscrito  $ip$  denota um ponto de integração, que nada mais é que o somatório sobre todos os pontos de integração na superfície.  $\Delta n_j$  é o vetor discreto normal à superfície e  $\Delta t$  é o passo de integração no tempo. O sobrescrito  $o$  indica uma propriedade no passo de tempo anterior e a barra no termo fonte,  $\bar{S}_\phi$ , indica um valor médio de  $S_\phi$  no volume de controle.

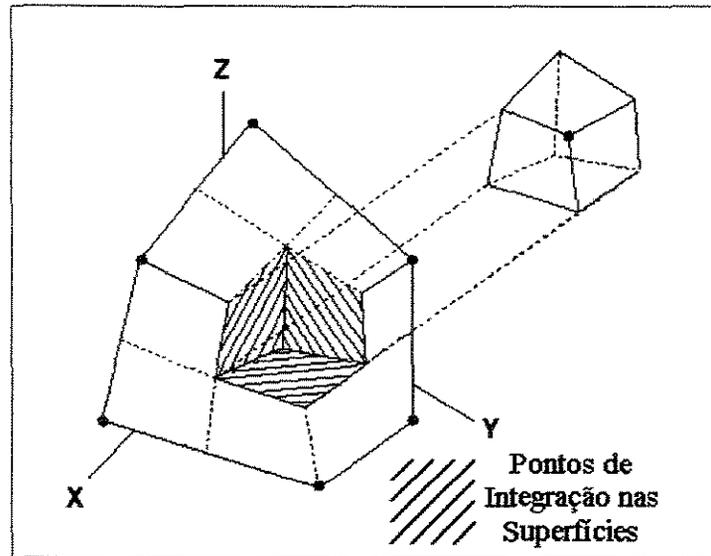


Figura 4.3: Elemento de fluxo dividido em oito octantes com um octante removido.

## 4.2 Esquemas de Interpolação

Os primeiros esquemas de interpolação para os termos convectivos das equações de transporte foram gerados a partir de escoamentos unidimensionais em que a direção do escoamento necessariamente era alinhada com a malha numérica. Extensões foram feitas de modo que estes esquemas fossem extrapolados para escoamentos bi e tridimensionais consecutivamente (PATANKAR, 1980). Esta classe de esquemas é denominada de esquemas de diferenciação à montante (UDS) e alguns esquemas de interpolação muito conhecidos desta classe são: “Upwind”, Diferenças Centrais (CDS), Híbrido (HYBRID), “Upwind” de segunda ordem (HUW) (THOMPSON e WILKES, 1982), “Upwind” de terceira ordem (QUICK) (LEONARD, 1979), entre outros. MARCHI (1993) apresenta em seu trabalho uma comparação entre vários esquemas de interpolação unidimensionais, incluindo de primeira e de ordens superiores destacando vantagens e desvantagens entre os esquemas.

O esquema “Upwind”, definição da classe UDS, emprega que o fluido move-se de um nó  $P$  até um nó  $E$ , conforme a Figura 4.4. Assim a estimativa para o valor do escalar  $\phi$  na face  $e$  é  $\phi_e = \phi_P$ . Isto é o mesmo que assumir  $\phi$  constante em todo o volume de controle, fazendo com que a solução fique livre de oscilações não-físicas. Entretanto, as predições utilizando o esquema “Upwind” são somente de primeira ordem causando dissipações dos gradientes e introduzindo grandes erros na solução.

Para melhorar a acurácia do esquema “Upwind”, uma correção,  $\Delta\phi_e$ , torna-se

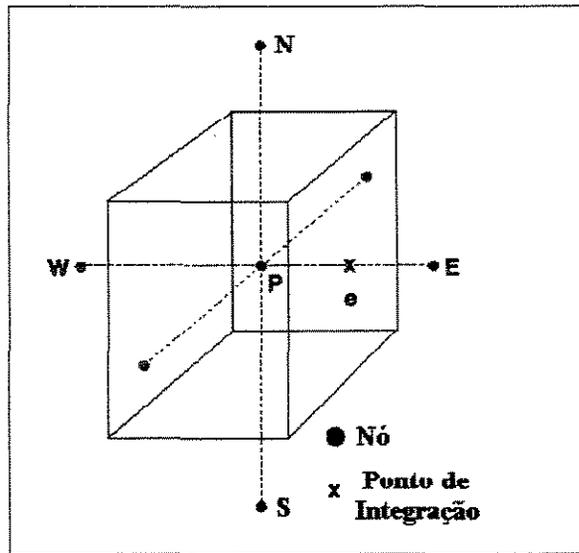


Figura 4.4: Arranjo de um volume de controle, nó e ponto de integração.

necessária tal que,

$$\phi_c = \phi_P + \Delta\phi_c. \quad (4.6)$$

O valor de  $\Delta\phi_e$  pode ser aproximado por,

$$\Delta\phi_c \approx \frac{\Delta x}{2} \left( \frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_e \quad (4.7)$$

em que  $(\partial\phi/\partial x)_e$  tem que ter acurácia de primeira ordem, no mínimo. Conseqüentemente,

$$\phi_c \approx \phi_P + \frac{\Delta x}{2} \left( \frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_e. \quad (4.8)$$

Utilizando abordagem de diferenças finitas centrada na face  $e$ , tem-se

$$\left( \frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_e \approx \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x} \quad (4.9)$$

surgindo assim, o esquema de diferenças centrais (CDS), a partir da combinação das equações (4.8) e (4.9), resultando em:

$$\phi_c \approx \frac{1}{2}\phi_P + \frac{1}{2}\phi_E. \quad (4.10)$$

A utilização deste perfil linear de interpolação deveria resultar em uma maior acurácia quando comparado com resultados providos por esquema “Upwind”, entretanto, a influência física deste esquema não é satisfatória. Esta pobre influência física

faz com que venha à tona dificuldades clássicas com o esquema CDS, tais como dificuldades de convergência em códigos iterativos, a necessidade de tratamentos especiais nas condições de contorno e oscilações não-físicas ao longo da simulação (Manual do CFX-TASCflow, 2001).

Uma das grandes desvantagens dos esquemas da classe UDS é que estes são responsáveis por erros de truncamento, levando a um fenômeno chamado de difusão numérica (PATANKAR, 1980; MALISKA, 1995). Isto se deve justamente pelo fato destes esquemas terem sido originados a partir de problemas unidimensionais e ainda são comumente aplicados para problemas multi-dimensionais. Face à esta realidade de esquemas UDS e a grande maioria de suas correções, as quais não foram desenvolvidas com bases físicas, surgiu uma nova classe denominada de esquemas com correções físico-convectivas (PAC). Um dos princípios básicos de esquemas PAC é que a álgebra resultante das equações possa representar corretamente as propriedades transportadas nos processos físicos. Isto requer que a avaliação de  $\Delta\phi_e$  reflita apropriadamente as interações fenomenológicas existentes nos processos físicos de convecção, difusão e termos fonte. Para facilitar o compreensão, a avaliação física de  $\Delta\phi_e$  será restrita para problemas dominados pela convecção e termos fonte. Considerando uma equação de transporte para um escalar qualquer com contribuição convectiva dominante e em sua forma não-conservativa,

$$\rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \rho v \frac{\partial \phi}{\partial y} + \rho w \frac{\partial \phi}{\partial z} = \dot{S}^\phi \quad (4.11)$$

em que  $u$ ,  $v$  e  $w$  são as velocidades nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  respectivamente. Rearranjando a equação (4.11) tem-se

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{1}{\rho u} \left[ \dot{S}^\phi - \rho v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \rho w \frac{\partial \phi}{\partial z} \right] \quad (4.12)$$

A equação (4.12) mostra claramente que a derivada  $\partial\phi/\partial x$  pode ser determinada através de influências físicas do termo fonte e das componentes  $y$  e  $z$  da parcela convectiva do escoamento. Substituindo a equação (4.12) em (4.7), a aproximação da correção resulta em

$$\Delta\phi_e = \frac{\Delta x}{2\rho u} \left[ \dot{S}^\phi - \rho v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \rho w \frac{\partial \phi}{\partial z} \right] \quad (4.13)$$

e é conhecida como termo de correção físico-convectiva. Dentro da grande classe envolvendo termos PAC, duas subclasses surgem, “Grid Upstream Schemes” e “Skewed Upstream Schemes” (SUDS). Uma vez que o código CFX-TASCflow<sup>TM</sup> utiliza

esquemas de interpolação da subclasse SUDS, apenas será abordada, ainda que de forma resumida, esta subclasse.

Esquemas do tipo SUDS, originalmente desenvolvidos por RAITHBY (1976), cujas idéias precursoras foram o desenvolvimento de funções de interpolação bidimensionais que eliminam a necessidade do componente convectivo dos termos PAC. Isto se dá pela introdução da seguinte transformação

$$\rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \rho v \frac{\partial \phi}{\partial y} + \rho w \frac{\partial \phi}{\partial z} = \rho U \frac{\partial \phi}{\partial s} \quad (4.14)$$

com  $U$  sendo a velocidade local do fluido e  $s$  a distância ao longo da direção do escoamento. Para casos com predominância convectiva, a equação (4.14) pode ser escrita como

$$\rho U \frac{\partial \phi}{\partial s} = \dot{S}\phi. \quad (4.15)$$

Tendo como base a equação (4.15), uma aproximação do valor de  $\phi$  no ponto de integração  $\phi_e$  é análogo à equação (4.7). Isto é

$$\phi_c \approx \phi_u + \Delta\phi_e \quad (4.16)$$

em que  $\phi_u$  é o valor de  $\phi$  na linha de corrente à montante do ponto de integração  $e$ , vide Figura 4.5, e  $\Delta\phi_e$  é uma correção necessária para contar com efeitos da variação do escalar  $\phi$  entre os pontos de integração  $u$  e  $e$ .

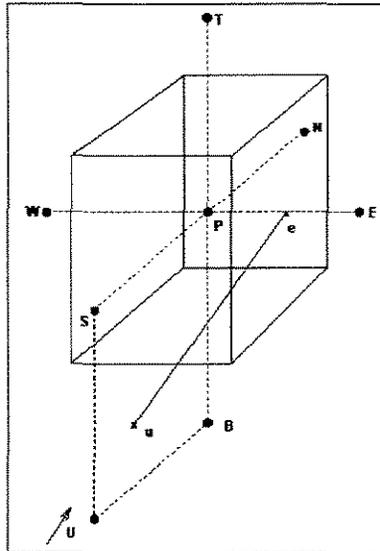


Figura 4.5: Esquema de um arranjo bidimensional para interpolação SUDS.

Conseqüentemente,  $\Delta\phi_e$  pode ser aproximado por

$$\Delta\phi_e \approx \ell \frac{\partial\phi}{\partial s} \quad (4.17)$$

em que  $\ell$  é a distância entre os pontos  $e$  e  $u$ . Adotando a correção físico-convectiva e substituindo a derivada da equação (4.15) em (4.17) resulta em

$$\phi_c = \phi_u + \frac{\ell}{\rho V} \bar{S}^\phi. \quad (4.18)$$

Em ambos esquemas originais SUDS desenvolvidos por RAITHY (1976), o termo PAC era negligenciado. LILLINGTON (1981) e Manual do CFX-TASCflow (2001) *aput.* HUGET (1985) identificaram a necessidade de incluir o efeito do gradiente de pressão na avaliação de  $\Delta\phi$ , equação (4.16), quando  $\phi$  for uma componente de velocidade. RAW (1985) *aput.* Manual do CFX-TASCflow (2001) também argumentou que a inclusão do termo de gradiente de pressão era essencial para seu esquema de variáveis co-localizadas.

O pacote computacional utilizado neste trabalho apresenta basicamente três esquemas de interpolação, um esquema de perfil linear (LPS - “Linear Profile Scheme”), outro de massa ponderada (MWS - “Mass Weighted Scheme”), ambos da subclasse SUDS, além do “Upwind”. O esquema LPS é formalmente de segunda ordem e seus resultados apresentam boa acurácia com uma pequena possibilidade de oscilações não-físicas das variáveis ao longo da solução. Um esquema alternativo é o MWS que é de primeira ordem, no entanto apresenta resultados com maior acurácia que os providos por esquemas UDS e variantes de mesma ordem.

Toda discussão anterior a respeito de esquemas SUDS foram abordadas somente para escoamentos com predominância do transporte convectivo, em que os efeitos difusivos foram negligenciados. Quando estes efeitos difusivos são significativos para o escoamento, a influência física da difusão nos termos PAC não deve ser negligenciada. Conseqüentemente, incluindo estes efeitos nos termos PAC para avaliação da derivada  $\partial\phi/\partial s$ , um exemplo é demonstrado abaixo

$$\frac{\partial\phi}{\partial s} = \frac{1}{\rho V} \left( \dot{S}^\phi + \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial z} \right) \right) = \frac{Q}{\rho V} \quad (4.19)$$

com

$$Q = \left( \dot{S}^\phi + \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial z} \right) \right)$$

### 4.2.1 Notação Geométrica

Ainda a respeito de esquemas tipo SUDS, cada face de um volume de controle era representada por um simples ponto de integração. E conforme comentado anteriormente, RONEL e BALIGA (1979) e SCHNEIDER e RAW (1986, 1987) demonstraram que é tão conveniente quanto vantajoso introduzir o conceito de elemento de fluxo, quase como um elemento finito. Em sumo, um elemento de fluxo é apresentado na Figura 4.6 e nada mais é que um elemento hexaédrico definido por oito nós adjacentes, denotados por  $(i, j, k)$ ,  $(i + 1, j, k)$ ,  $(i, j + 1, k)$ ,  $(i + 1, j + 1, k)$ ,  $(i, j, k + 1)$ ,  $(i + 1, j, k + 1)$ ,  $(i, j + 1, k + 1)$  e  $(i + 1, j + 1, k + 1)$ . Esta notação é simplificada quando se refere cada nó em relação a sua respectiva posição nodal na forma  $(i, j, k)$ . Por analogia, e ainda de acordo com a Figura 4.6, estes nós também podem ser denotados como conjuntos de índices binários:  $(0, 0, 0)$ ,  $(1, 0, 0)$ ,  $(0, 1, 0)$ ,  $(1, 1, 0)$ ,  $(0, 0, 1)$ ,  $(1, 0, 1)$ ,  $(0, 1, 1)$  e  $(1, 1, 1)$ .

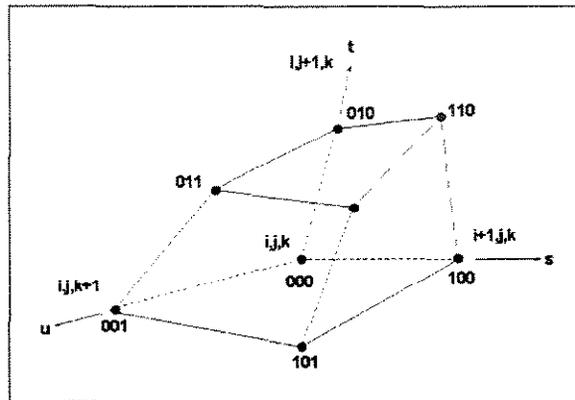


Figura 4.6: Elemento de fluxo hexaédrico linear e com oito nós.

Este elemento é então dividido em octantes, conforme Figura 4.3, por três planos definidos em  $s = 0,5$ ,  $t = 0,5$  e  $u = 0,5$ , respectivamente, em que  $s$ ,  $t$  e  $u$  são variáveis paramétricas para as funções de forma linear dos elementos (Manual do CFX-TASCflow, 2001). Cada octante de um elemento de fluxo é associado com um nó. Assim, com esta breve definição de octantes, um volume de controle é definido por todos os octantes que dividem o mesmo nó. Cada face deste volume de controle contém quatro faces de octantes. Conseqüentemente quatro pontos de integração, um para cada face do octante, são necessários para uma face do volume de controle. Todos os pontos de integração, juntamente com seus conjuntos binários são apresentados nas Figuras 4.7, 4.8 e 4.9.

Percebe-se pela Figura 4.7 que um plano mediano aos nós paralelos ao eixo

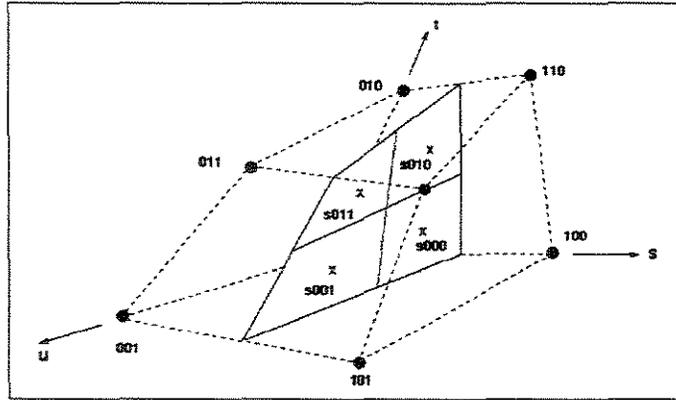


Figura 4.7: Pontos de Integração nas faces dos octantes coincidentes com  $s = 0, 5$ .

coordenado  $s$  é traçado. Notam-se ainda, as quatro faces e seus pontos de integração por face de octante, apresentados na mesma figura. Procedimentos análogos são realizados para as Figuras 4.8 e 4.9.

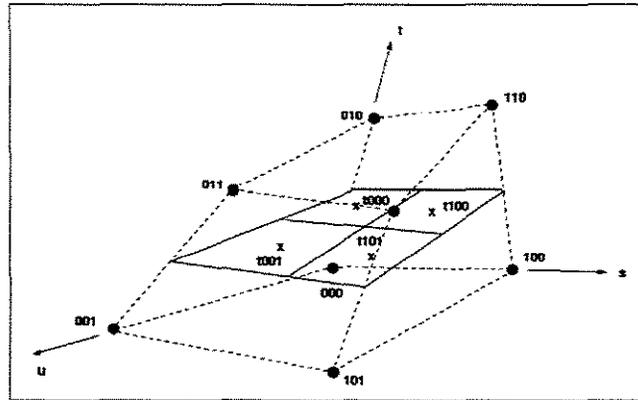


Figura 4.8: Pontos de Integração nas faces dos octantes coincidentes com  $t = 0, 5$ .

## 4.2.2 Esquema de Perfil Linear (LPS)

Este esquema de interpolação, implementado no código, é uma extensão do esquema obtido por Manual do CFX-TASCflow (2001) *aput*. RAW (1985). As equações no ponto de integração com LPS são derivadas pela formulação de uma representação discreta da equação (4.19), a cada ponto de integração, e expressa em termos dos pontos de integração e dos nós adjacentes. Para propósitos ilustrativos, considerar-se-á o ponto  $(0, 1, 1)$  coincidente com a face do volume de controle no plano constante  $s$ , vide Figura 4.7. Para formular uma representação discreta do lado esquerdo da equação (4.19), supõe-se que haja uma certa propriedade sendo transportada, uma

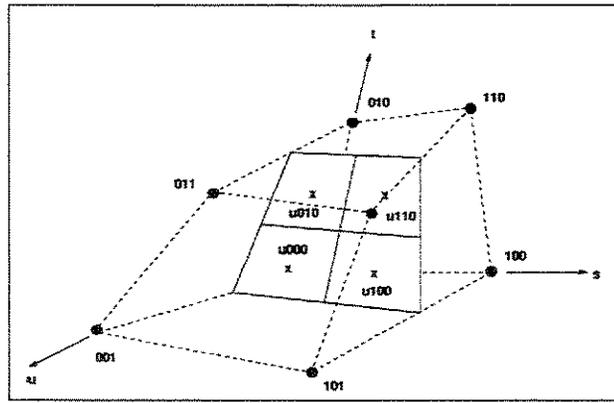


Figura 4.9: Pontos de Integração nas faces dos octantes coincidentes com  $u = 0,5$ .

linha de corrente por exemplo, do ponto de integração  $S011$  até a face do elemento de fluxo, que por sua vez faz interseção com a face  $u$  do volume de controle. Assim, a equação fica

$$\frac{\partial \phi}{\partial s} = \frac{(\phi_{S011} - \phi_u)}{\ell} = \frac{Q}{\rho V} \quad (4.20)$$

em que  $\phi_u$  é o valor do escalar  $\phi$  no ponto de interseção e  $\ell$  é a distância entre o ponto de integração  $S011$  e a interseção. Duas variantes do esquema LPS são possíveis no CFX-TASCflow<sup>TM</sup>.

- LPS Puro: O valor de  $\phi_u$  é determinado por uma interpolação trilinear dos valores nodais de  $\phi$  contidos na face do elemento de fluxo, o qual faz interseção com uma linha reta imaginária a partir do ponto de integração  $S011$  a montante da direção local do escoamento.
- LPS Modificado: O valor de  $\phi_u$  é primeiramente determinado por LPS Puro. Em seguida, alguns coeficientes de interpolação são modificados. Esta modificação limita efetivamente as más influências numéricas de coeficientes negativos que estão presentes no LPS Puro, porém preservando a acurácia fornecida por este esquema (Manual do CFX-TASCflow, 2001).

Por questões de conveniência não será apresentada a discussão a respeito do esquema de interpolação MWS, uma vez que este esquema não apresentou bons resultados e vários problemas de convergência foram encontrados com sua utilização nas primeiras simulações deste trabalho. Maiores detalhes sobre estes problemas, bem como estratégias de solução serão explorados no capítulo seguinte.

### 4.3 Acoplamento Pressão-Velocidade

Uma abordagem comum para derivar a representação discreta da conservação da massa requer a utilização de uma malha deslocada em que a equação da quantidade de movimento (*momentum*) é integrada em seus três volumes de controle, de cada nó, para evitar problemas com oscilações nos campos de pressão. Esta abordagem foi muito utilizada, e primeiramente obtida, em escoamentos unidimensionais (PATANKAR, 1980) e mais tarde em escoamentos bidimensionais (MEIER, 1998; ALVES, 1998). Quando parte-se para a terceira dimensão este tipo de abordagem acaba ficando comprometida, uma vez que dificuldades de implementação e absurdo esforço computacional surgem. Face à esta realidade, esforços foram concentrados para que algoritmos de acoplamento pressão-velocidade fossem resolvidos utilizando uma simples célula, também conhecido como arranjo co-localizado (RHIE e CHOW, 1983; PRAKASH e PATANKAR, 1985; SCHNEIDER e RAW, 1987).

A representação algébrica da conservação da massa em um volume de controle multi-dimensional pode ser expressa por

$$\sum_{ip} \rho_{ip} U_{ip} \cdot \vec{A}_{ip} \quad (4.21)$$

na equação acima  $U_{ip}$  representa o vetor velocidade no ponto de integração e  $\vec{A}_{ip}$  é o vetor área de superfície no ponto de integração definido por  $\vec{n} \cdot A$ , produto entre o vetor normal ao ponto de integração da superfície e a área do mesmo. De acordo com a equação nodal em sua forma discretizada, a componente de velocidade  $u$ , na direção  $x$ , da equação de transporte da quantidade de movimento pode ser expressa por

$$\begin{aligned} \left( A_p^u + \rho \frac{\text{Vol}}{\Delta t} \right)_{NP} u_{NP} = & \left( \sum_{nb} A_{nb}^u u_{nb} \right)_{NP} - \text{Vol}_{NP} \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)_{NP} \\ & + b_{NP}^u + \left( \rho \frac{\text{Vol}}{\Delta t} \right)_{NP} u_{NP}^0 \end{aligned} \quad (4.22)$$

com o subscrito  $NP$  denotando que a equação do volume de controle está associada com o ponto nodal. Os termos transientes da equação (4.22) foram discretizados de forma explícita assegurando que a equação do *momentum* para  $u_{ip}$  inclua os efeitos do passo de tempo na simulação. Dividindo esta equação por  $A_p^u$ ,

$$(1 - cd_{NP})u_{NP} = \hat{u}_{NP} + d_{NP} \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)_{NP} - cd_{NP}u_{NP}^0 \quad (4.23)$$

em que  $c = \frac{\rho}{\Delta t}$ ,  $d_{NP} = -\frac{\text{Vol}_{NP}}{A_p^u}$ ,  $\hat{u}_{NP} = \frac{[(\sum_{nb} A_{nb}^u u_{nb})_{NP} + b_{NP}^u]}{A_p^u}$  e  $u^0$  é o valor da componente de velocidade no instante de tempo anterior. Assumindo que a equação da

componente  $x$  do *momentum* para  $u_{ip}$  no ponto de integração tem a mesma forma que a equação (4.22). Logo,

$$(1 - cd_{ip})u_{ip} = \hat{u}_{ip} + d_{ip} \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)_{ip} - cd_{ip}u_{ip}^0 \quad (4.24)$$

acima,  $d_{ip}$  e  $\hat{u}_{ip}$  são médias dos valores nodais vizinhos a  $d_{NP}$  e  $\hat{u}_{NP}$ , respectivamente. A derivada  $(\partial P/\partial x)_{ip}$  é avaliada em função da pressões nodais vizinhas ao ponto de integração,  $ip$ , e  $u_{ip}^0$  é o valor de  $u_{ip}$  no passo de tempo anterior. A obtenção de  $\hat{u}_{ip}$  é feita através do rearranjo da equação (4.23) em função de  $\hat{u}_{NP}$ , tal que

$$\hat{u}_{ip} = \left[ \overline{(1 - cd_{NP})u_{NP} - d_{NP} \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)_{NP} + cd_{NP}u_{NP}^0} \right] \quad (4.25)$$

A barra sobrescrita indica um valor médio. Substituindo a equação (4.25) em (4.24) resulta:

$$(1 - cd_{ip})u_{ip} = \left[ \overline{(1 - cd_{NP})u_{NP} - d_{NP} \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)_{NP} + cd_{NP}u_{NP}^0} \right] + d_{ip} \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)_{ip} - cd_{ip}u_{ip}^0 \quad (4.26)$$

Finalmente, se  $\overline{d_{NP} \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)_{NP}}$  for aproximadamente igual a  $d_{ip} \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)_{NP}$ , logo, a expressão acima, equação (4.26) reduz-se a:

$$u_{ip} = \bar{u}_{NP} + f \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)_{ip} - \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)_{NP} \right] - cf(u_{ip}^0 - \bar{u}_{NP}^0) \quad (4.27)$$

com  $f = \frac{d_{ip}}{1 - cd_{ip}}$ . O primeiro termo da equação (4.27) representa uma média dos valores nodais vizinhos ao ponto de integração e os outros dois termos representam as correções desta velocidade. A primeira parcela de correção é função dos gradientes locais de pressão e a segunda é função de valores da componente de velocidade em um instante de tempo anterior. Esta mesma equação, de forma análoga, pode ser escrita para os outros dois componentes de velocidade restantes,  $v$  e  $w$ , velocidades na direção  $y$  e  $z$ , respectivamente. Portanto,

$$v_{ip} = \bar{v}_{NP} + f \left( \left( \frac{\partial P}{\partial y} \right)_{ip} - \left( \frac{\partial P}{\partial y} \right)_{NP} \right) - cf(v_{ip}^0 - \bar{v}_{NP}^0) \quad (4.28)$$

$$w_{ip} = \bar{w}_{NP} + f \left( \left( \frac{\partial P}{\partial z} \right)_{ip} - \left( \frac{\partial P}{\partial z} \right)_{NP} \right) - cf(w_{ip}^0 - \bar{w}_{NP}^0) \quad (4.29)$$

A substituição das equações (4.27), (4.28) e (4.29) na equação (4.21), para todas as faces dos volumes de controle, resulta na equação completa da continuidade, em três dimensões, envolvendo os valores nodais das variáveis  $u$ ,  $v$ ,  $w$  e  $P$ . Por definição, esta equação da continuidade é dominante em  $P$  e não admite a possibilidade de desacoplamento entre a pressão e a velocidade, e soluções em regime permanente são geradas independentemente do passo de tempo utilizado nos cálculos. Maiores detalhes sobre esta metodologia de solução podem ser encontradas no trabalho de HUTCHINSON *et al.* (1988).

## 4.4 Compressibilidade

Várias questões surgem quando modela-se escoamento incompressível e com arranjo colocalizado, conforme discutido anteriormente. Estes métodos podem ser extrapolados para discretizar os escoamentos compressíveis de uma maneira geral. O código computacional CFX-TASCflow<sup>TM</sup> baseia-se no trabalho realizado por VANDOORMAAL e RAITHYBY (1987) para o tratamento deste tipo de escoamento.

Assumindo, por simplicidade, um escoamento unidimensional compressível através de um duto com área transversal constante,  $A$ , conforme Figura 4.10 e realizando sua representação algébrica da conservação da massa sobre um volume de controle, expresso por

$$\rho_e u_e A - \rho_w u_w A = 0 \quad (4.30)$$

em que  $\rho$  é a massa específica e  $u$  é a velocidade do fluido nas faces  $e$  e  $w$  do volume de controle. Estas faces correspondem aos pontos de integração da formulação de elementos de fluxo para qualquer dimensão. Para este tipo de escoamento, a massa específica não é mais constante, no entanto ainda depende da solução do escoamento fluido. Supondo um fluido qualquer e este se comportando como gás ideal, a seguinte relação é válida  $\rho = P/RT$ .

Assim como nos escoamentos incompressíveis, o papel da pressão é fazer com que o escoamento satisfaça a equação da continuidade. Entretanto, para escoamentos compressíveis, há dois aspectos importantes para que isto ocorra. O primeiro, também visualizado em casos incompressíveis, é que a pressão afeta o fluxo mássico transportando velocidades através das equações do *momentum*. O novo efeito aparece como uma mudança de pressão em função de alterações da massa específica via equação de estado.

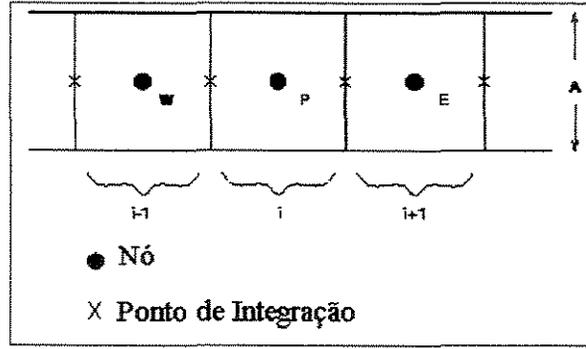


Figura 4.10: Arranjo de um escoamento unidimensional em um duto de área constante.

### Linearização

Os termos da equação (4.30) são tratados através de linearização Newton-Raphson:

$$(\rho u)^n A \simeq \rho^n u^o A + \rho^o u^n A - \rho^o u^o A \quad (4.31)$$

os sobrescritos  $n$  e  $o$  indicam um novo e um antigo (passo de tempo anterior) valor, respectivamente. Esta equação demonstra que há dois termos envolvendo novas variáveis, os dois primeiros da equação (4.31), sendo o primeiro relativo a um acoplamento pressão-massa específica e o segundo referente a um acoplamento pressão-velocidade. O termo  $\rho^o u^n A$  é tratado exatamente como no caso incompressível. A equação completa para este caso é apresentada a seguir:

$$\begin{aligned} \rho_e^o u_e = \rho_e^o \left( \frac{1}{2}(u_i + u_{i+1}) \right) \\ + \rho_e^o \left( \frac{1}{2}(d_i + d_{i+1}) \left\{ \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)_e - \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)_i + \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right)_{i+1} \right] \right\} \right). \end{aligned} \quad (4.32)$$

O novo termo  $\rho^n u^o A$  requer um tratamento especial denominado de representação no ponto de integração para a massa específica (Manual do CFX-TASCflow, 2001). Seu tratamento e como este é implementado no pacote computacional serão omitidos neste trabalho. A conversão de  $\rho$  para pressão é pura substituição utilizando uma equação de estado. Assim, para um gás ideal:

$$\rho^n u^o A = \frac{P^n}{RT^o} u^o A \quad (4.33)$$

em que  $R$  é a constante dos gases ideais,  $T^o$  é a temperatura e  $u^o$  é a velocidade, ambos em um passo de tempo anterior.

# Capítulo 5

## CFD em Motores

Almeja-se neste breve capítulo elucidar alguns conceitos do objeto de estudo deste trabalho, além de sua abordagem via simulação. Apresentam-se algumas características geométricas e funcionais da câmara de combustão, além das estratégias iniciais de simulação e os estudos de caso escolhidos para esta investigação científica.

Conforme comentado anteriormente o objeto de estudo a ser abordado neste trabalho é a câmara de combustão de um FIAT Palio 1.0 de quatro estágios e duas válvulas por cilindro. Sua representação esquemática pode ser visualizada na Figura 5.1.

A partir da Figura 5.1,  $L$  é o curso do pistão;  $D_c$  é o diâmetro do cilindro;  $D_{va}$  e  $D_{ve}$  são os diâmetros da tulipa das válvulas de admissão e exaustão, respectivamente;  $D_g$  é o diâmetro da guia de válvula;  $L_v$  é o levantamento das válvulas e  $L_m$  representa o comprimento axial morto da câmara. E por fim, PMS e PMI são os pontos mortos superior e inferior, respectivamente. Algumas características geométricas do motor FIAT Palio são apresentadas na Tabela 5.1.

Para que se compreenda melhor como funciona este motor, alguns breves conceitos serão discutidos a seguir.

### 5.1 Motores de Quatro Estágios e Curso do Pistão

De uma maneira geral, o funcionamento de um motor a quatro estágios, também conhecido como motores de quatro tempos, procede da seguinte forma: inicialmente o pistão localizado em seu ponto morto superior (PMS da Figura 5.1) acelera em

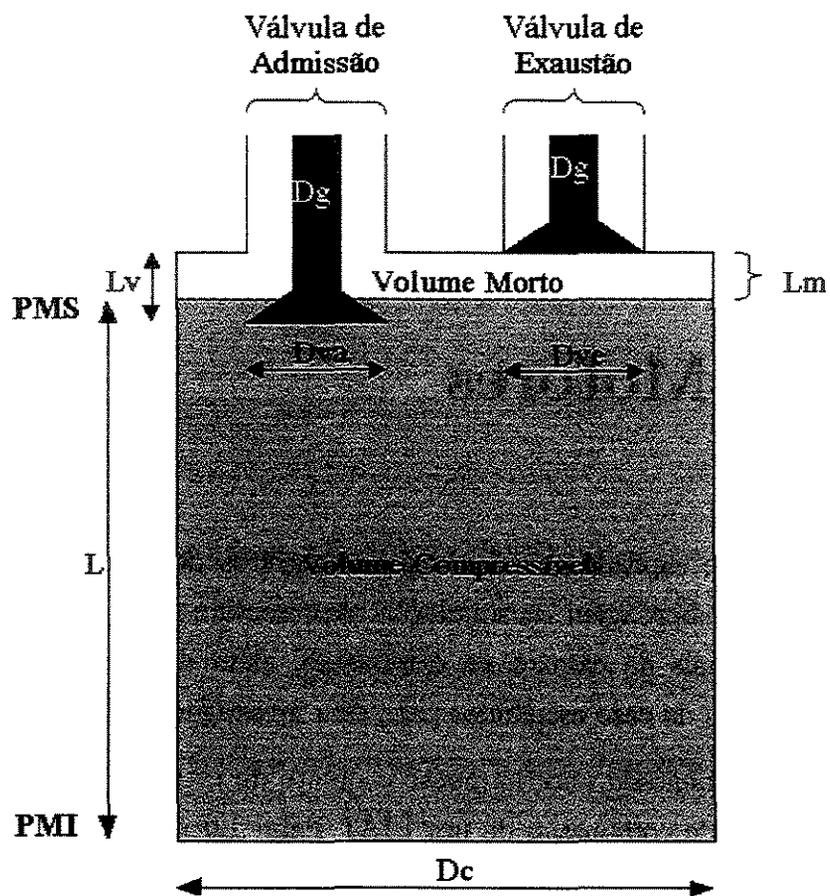


Figura 5.1: Ilustração esquemática de um motor de duas válvulas por cilindro.

Parâmetro	Valor	Unidade
Diâmetro ( $D_c$ )	76,00	mm
Curso ( $L$ )	54,80	mm
Comprimento morto ( $L_m$ )	6,56	mm
Cilindrada	994,39	cm <sup>3</sup>
Diâm. Tulipa Válv. Admissão ( $D_{va}$ )	36,00	mm
Diâm. Tulipa Válv. Exaustão ( $D_{ve}$ )	29,00	mm
Diâmetro da Guia de Válvula ( $D_g$ )	8,00	mm
Levantamento das válvulas ( $L_v$ )	7,50	mm

Tabela 5.1: Características geométricas do motor FIAT Palio 1.0.

movimento descendente ao longo de seu curso criando uma depressão no interior do cilindro, fazendo com que uma carga fresca de mistura ar/combustível entre por via da válvula de admissão (considerando um motor qualquer que possui duas válvulas por cilindro, uma de admissão e outra de exaustão) que estará aberta neste período de tempo. Próximo de seu curso máximo, o pistão começa a desacelerar, diminuindo a depressão no cilindro e a indução desta carga fresca, até alcançar o ponto morto inferior (PMI da Figura 5.1). Esta etapa é conhecida como **admissão**.

No final desta primeira etapa, o pistão reverte sua direção e começa a percorrer seu curso em movimento ascendente. Após esta reversão a válvula de admissão fecha e o pistão começa a comprimir o cilindro juntamente com a mistura ar/combustível admitida anteriormente. À medida em que o pistão sobe, o volume do cilindro diminui, aumentando conseqüentemente a pressão em seu interior. Próximo ao fim do estágio de **compressão**, o pistão desacelera e estaciona por frações de milésimos de segundo no PMS, onde imediatamente uma centelha é criada a partir de uma vela de ignição (considerando um motor à gasolina) fazendo com que a mistura ar/combustível comprimida entre em combustão. Com a explosão desta mistura, há uma imensa liberação de energia e subitamente um grande aumento de pressão no cilindro, resultando novamente na reversão do deslocamento do pistão. Esta etapa é conhecida como **expansão** e é oriunda da ignição do combustível. E por fim, na etapa de **exaustão**, os gases de combustão originados da explosão são liberados através de um curso ascendente do pistão juntamente com a abertura da válvula de exaustão.

A dinâmica do curso do pistão do FIAT Palio pode ser regida pela equação a seguir, extraída do trabalho de ZDENEK *et al.* (2001), e que é função de alguns parâmetros geométricos do motor, como o tamanho da biela e o curso do pistão, além claro, do ângulo do virabrequim,  $\theta$ . Assumindo ainda que o curso dá-se em direção ao eixo coordenado  $y$ , a equação fica:

$$y_{\text{pistão}} = -\frac{L}{2} \left( \frac{2B}{L} + 1 - \cos(\theta) \left( \left( \frac{2B}{L} \right)^2 - \sin^2(\theta) \right)^{1/2} \right) \quad (5.1)$$

O tamanho da biela ( $B$ ) é de aproximadamente 100mm. A Figura 5.2 apresenta os quatro estágios do motor já aplicados à equação (5.1). Nota-se nesta figura que o ciclo completo do motor acontece entre  $0 < \theta < 720$ , ou seja, duas voltas completas do virabrequim.

O parâmetro  $\theta$  nada mais é que o ângulo em que o virabrequim se encontra em um determinado instante de tempo. O virabrequim é uma peça, geralmente um

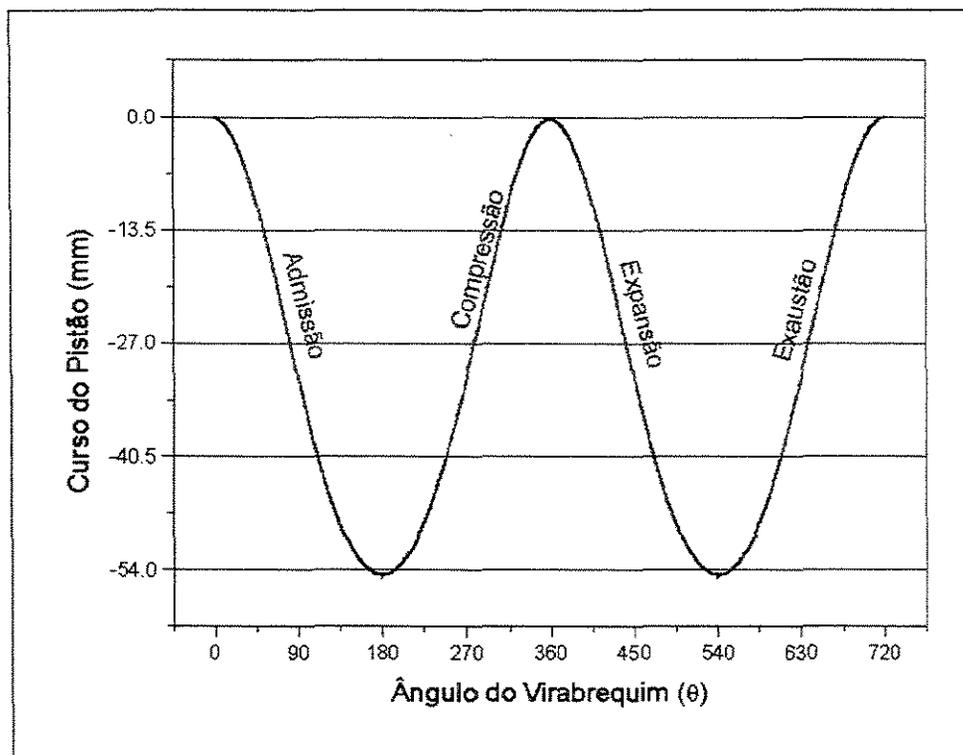


Figura 5.2: Os quatro estágios do pistão a partir da equação da senóide.

disco giratório, responsável pela movimentação do pistão. Conforme o ângulo desta peça, fará com que a biela, uma haste de metal ligada diretamente ao virabrequim, empurre o pistão em movimento ascendente ou descendente. A Figura 5.3 apresenta uma ilustração esquemática de um motor real, destacando a biela, o virabrequim e o came, este último, responsável pela movimentação das válvulas.

## 5.2 Curva de Came e Tempo de Abertura

O came é o dispositivo responsável pelo controle de abertura e fechamento das válvulas no cilindro, vide Figura 5.3. Sua característica de construção e operação varia de acordo com o modelo do motor e fabricante. Para o motor FIAT Palio 1.0, o came apresenta a seguinte configuração de abertura de válvulas, de acordo com a Tabela 5.2.

Salienta-se que o ângulo de permanência de ambas válvulas é de 218 graus, isto é, o tempo necessário para que a válvula abra e feche. Uma vez que a configuração do came instalado no FIAT Palio e sua curva de abertura não foram fornecidos, trabalhar-se-á com uma curva genérica provinda e ajustada da literatura(HEISLER, 1995). Assim

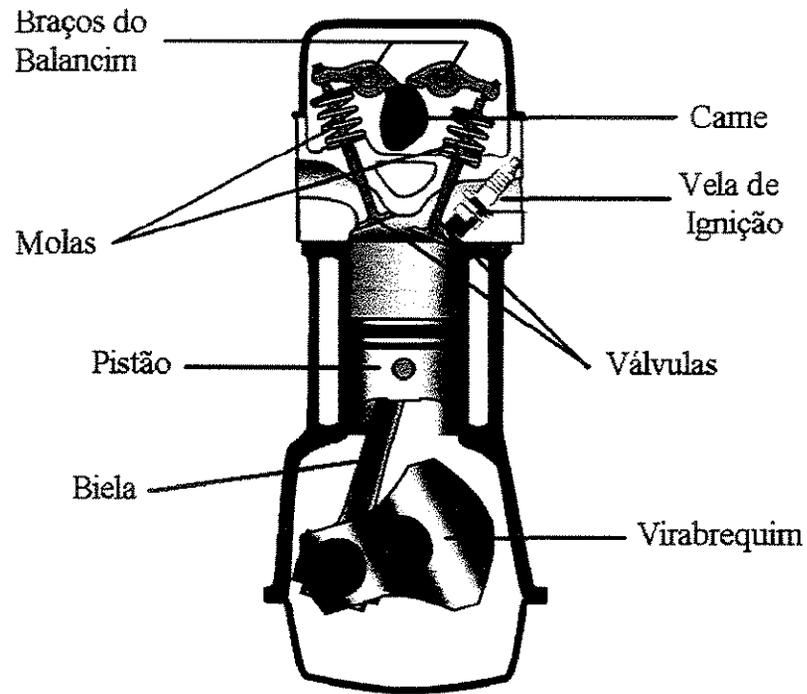


Figura 5.3: Ilustração genérica de um motor real.

Ângulo	Graus	Posição
Início da Admissão	9,0	Antes do PMS
Final da Admissão	29,0	Depois do PMI
Início da Exaustão	0,0	Antes do PMI
Final da Exaustão	38,0	Depois do PMS

Tabela 5.2: Controle de abertura das válvulas.

como a dinâmica do pistão, a curva de abertura das válvulas também pode ser descrita por uma senóide, conforme a equação abaixo:

$$y_{\text{válvulas}} = -\frac{L_v}{2} [1 - \cos(\xi\theta)] \quad (5.2)$$

em que  $L_v$  é o levantamento das válvulas,  $\xi$  é uma constante qualquer, e  $\theta$  é o ângulo do virabrequim. A curva de abertura das válvulas correspondente a equação 5.2 é apresentada na Figura 5.4.

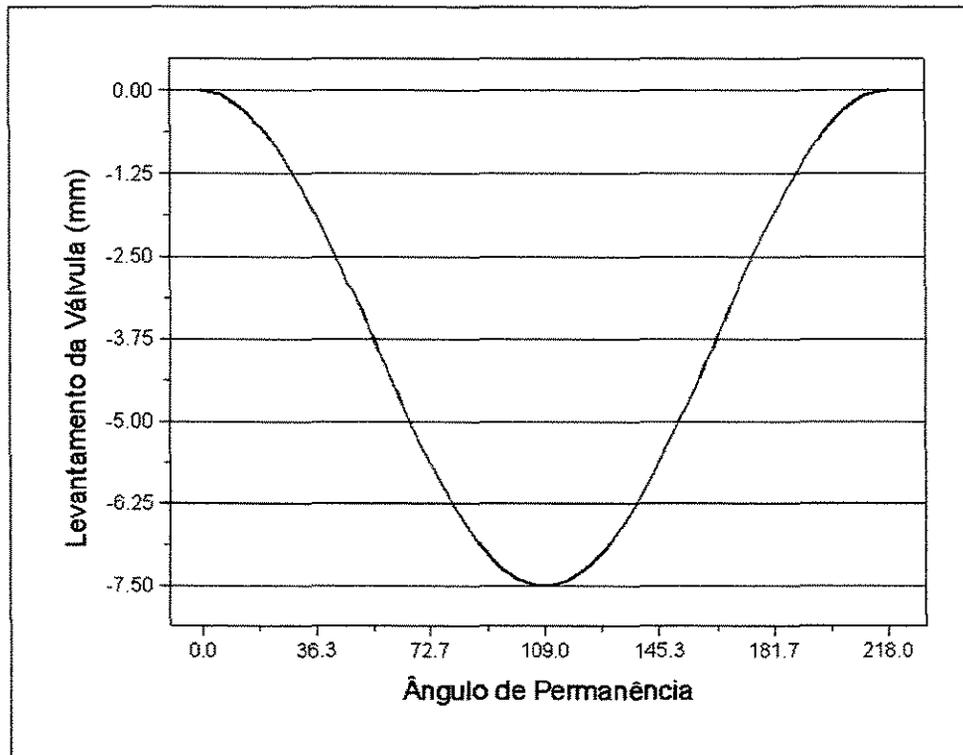


Figura 5.4: Curva de levantamento das válvulas.

Ainda de acordo com a Figura 5.1, a Tabela 5.2 indica que a válvula de exaustão abre exatamente no PMI, isto corresponde a um  $\theta = 540^\circ$ . Esta exaustão encerra a 38 graus depois do PMS, ou seja:  $\theta = 720^\circ + 38^\circ = 0^\circ + 38^\circ = 38^\circ$ . A admissão, de maneira análoga, inicia em  $\theta = 720^\circ - 9^\circ = 711^\circ$ . Isto significa que ambas válvulas ficam abertas simultaneamente em um certo intervalo de tempo, exatamente de  $47^\circ$  de ângulo. Este intervalo de tempo é denominado de ângulo de cruzamento.

### 5.3 Solução dos Estágios do Motor

A partir dos conceitos abordados anteriormente, como a curva de levantamento e ângulo de cruzamento, partiu-se para uma modificação da estratégia de solução deste problema. Assim, em vez de resolver os quatro estágios padrões deste motor, resolvem-se cinco estágios, ou seja, os quatro estágios padrões mais um, referente ao último estágio, exaustão, de um ciclo anterior. Conseqüentemente, o primeiro estágio refere-se à exaustão de uma etapa anterior,  $180^\circ$ , e os outros quatro estágios restantes padrões do ciclo de um motor, o que corresponde a  $720^\circ$  que o virabrequim percorre. Portanto, partiu-se para a estratégia de resolver  $900^\circ$  de ângulo do virabrequim justamente para captar os efeitos fenomenológicos encontrados durante o ângulo de cruzamento, posição esta em que ambas válvulas encontram-se simultaneamente abertas. A Figura 5.5 apresenta todos os estágios, e os exatos instantes, os quais as válvulas encontram-se abertas. Já a Tabela 5.3 expõe em uma forma compacta todos os estágios do motor em seus respectivos ângulos do virabrequim.

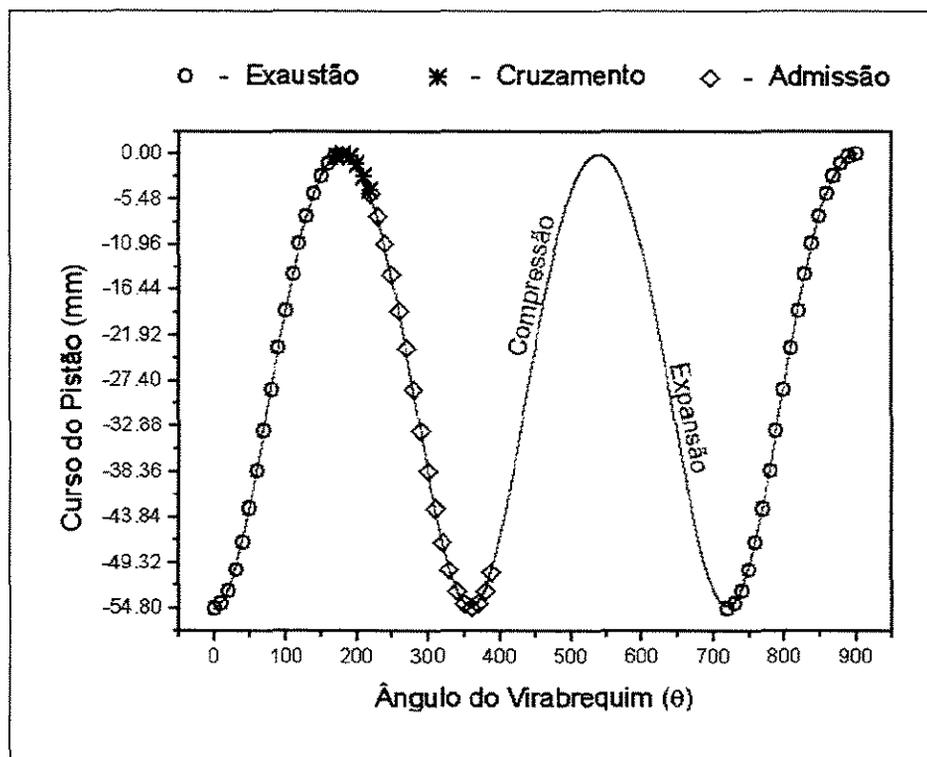


Figura 5.5: Os cinco estágios do motor a serem resolvidos neste trabalho.

Ângulo do Virabrequim	Estágio
$0 < \theta < 171$	Exaustão
$171 \leq \theta < 218$	Cruzamento
$218 \leq \theta < 389$	Admissão
$389 \leq \theta < 540$	Compressão
$540 \leq \theta < 720$	Expansão
$720 \leq \theta < 900$	Exaustão

Tabela 5.3: Estágios do motor em função do ângulo do virabrequim.

## 5.4 Grid Numérico

Desde os estudos primários de uma câmara de combustão bem simplificada, até o arranjo atual, esta etapa demandou meses para ser concluída. Por fim, gerou-se um grid, e adaptando-o várias vezes, chegou-se a um arranjo que obtivesse condições ideais de trabalho.

Uma vez obtido o arranjo desejado, construíram-se dois grids numéricos de forma a investigar a influência computacional nas variáveis de interesse devido a quantidade de elementos em cada grid. O grid *A*, primeiro a ser estudado após alcançado o arranjo atual, possui um pouco mais de 4.200 elementos, enquanto o grid *B*, com um trabalho de refinamento em cima do grid *A*, possui aproximadamente 10.400 elementos.

### 5.4.1 Estimativas Iniciais e Condições de Contorno

A idealização deste novo arranjo ainda é bidimensional e poucas condições de contorno são necessárias a este problema, uma entrada, onde ocorrerá a admissão, e uma saída, onde ocorrerá a descarga de fluido. Estas condições de contorno estão destacadas na Figura 5.6. Para as paredes do domínio, são utilizadas condições de contorno padrões do pacote computacional, ou seja, condição de não-deslizamento e sem fluxo de calor, adiabático. No que se refere ao escoamento, uma breve síntese das condições de contorno necessárias a este problema são apresentadas a partir da Tabela 5.4. Salienta-se que todas estas condições de contorno são constantes e válidas para todos os ciclos do motor.

Nota-se a partir da Tabela 5.4 que as condições de contorno são praticamente as mesmas para ambas válvulas. A pressão nas fronteiras é estática quando o fluido

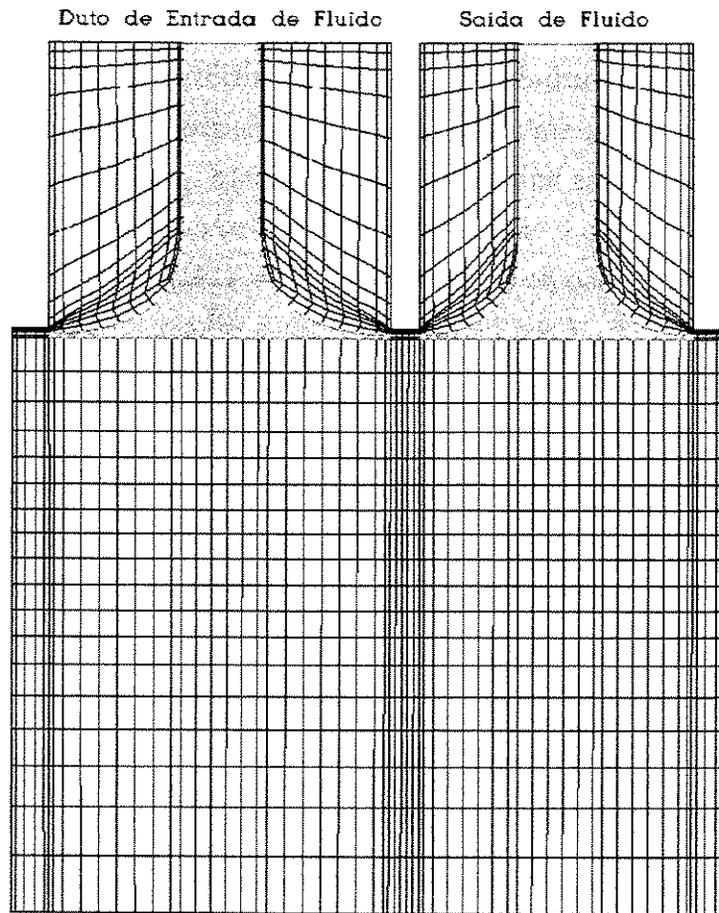


Figura 5.6: Grid A e suas condições de contorno.

Condição de Contorno	Válvula de Admissão	Válvula de Exaustão
Pressão(total ou estática)	101.325,0Pa	101.325,0Pa
Temperatura	300K	300K
Intensidade de Turbulência	0,037	0,037
Comp. de Escala Turb. ( $\ell_t$ )	0,00187	0,00183

Tabela 5.4: Condições de contorno para o motor.

está saindo do cilindro e total quando está entrando no domínio computacional. Isto é característica da condição de contorno e possui esta particularidade que permite tal funcionalidade. Assim, os parâmetros temperatura, intensidade de turbulência e comprimento de escala turbulenta,  $\ell_t$ , só serão utilizados quando o fluido estiver entrando no domínio, isto é, ambos parâmetros são necessários para os valores de  $k$  e  $\varepsilon$  na condição de contorno das válvulas, respectivamente. A intensidade de turbulência utilizada é um valor padrão e empírico comumente empregado e  $\ell_t$  é definido como o diâmetro hidráulico na região de entrada, isto é,  $\ell_t = 4.A_{en}/Per_{en}$ , em que  $A_{en}$  é a área de entrada do fluido e  $Per_{en}$  é seu perímetro. Ambos valores foram calculados com base às fronteiras das válvulas na malha numérica bidimensional.

Por se tratar de uma idealização bidimensional avaliam-se somente os planos X-Y do escoamento. Assim, salienta-se que há dois volumes de controle na direção normal ao plano demonstrado na Figura 5.6. Isto faz-se necessário pela forma em que os esquemas de interpolação são implementados no CFX-TASCflow<sup>TM</sup>, ou seja, por mais que a idealização seja bidimensional, o código acaba resolvendo a terceira componente de velocidade mesmo que esta não contribua significativamente nos resultados.

Nota-se claramente o arranjo das válvulas e o arranjo do grid próximo a elas. Alguns dias de trabalho e muitas modificações foram feitas até este grid ser obtido. O grande problema ocorre quando o pistão e as válvulas movem-se simultaneamente, assim, cuidados extremos foram tomados para que a manipulação deste conjunto não resultasse em estrangulamento de elementos, acarretando em volumes negativos das células.

As estimativas iniciais são as mais simples possíveis, uma pressão ambiente de 1,01325bar (101.325,0Pa) e uma temperatura de 27°C (300K) são prescritas para todos os nós do domínio. Toda mudança destas e outras propriedades se dá em função do deslocamento, pressurização, expansão e demais fenômenos na câmara de combustão ao longo dos estágios do motor.

## 5.4.2 Estratégias de Solução

Conforme comentado anteriormente, quando parte-se para um estudo desta natureza o trabalho deve ser gradativo. Portanto, para este novo grid, a seguinte estratégia foi adotada, primeiramente toda a dinâmica de movimentação da malha foi acertada. Uma vez ajustada esta dinâmica, partiu-se para o escoamento incompressível com a introdução da turbulência, porém sem o total fechamento das válvulas. Concluída esta

etapa, partiu-se então para a compressibilidade, condição essencial para este trabalho. A Figura 5.7(a) apresenta a deformação da malha em um instante em que a válvula de admissão está aberta. Já a Figura 5.7(b) apresenta um instante em que a válvula de exaustão está aberta.

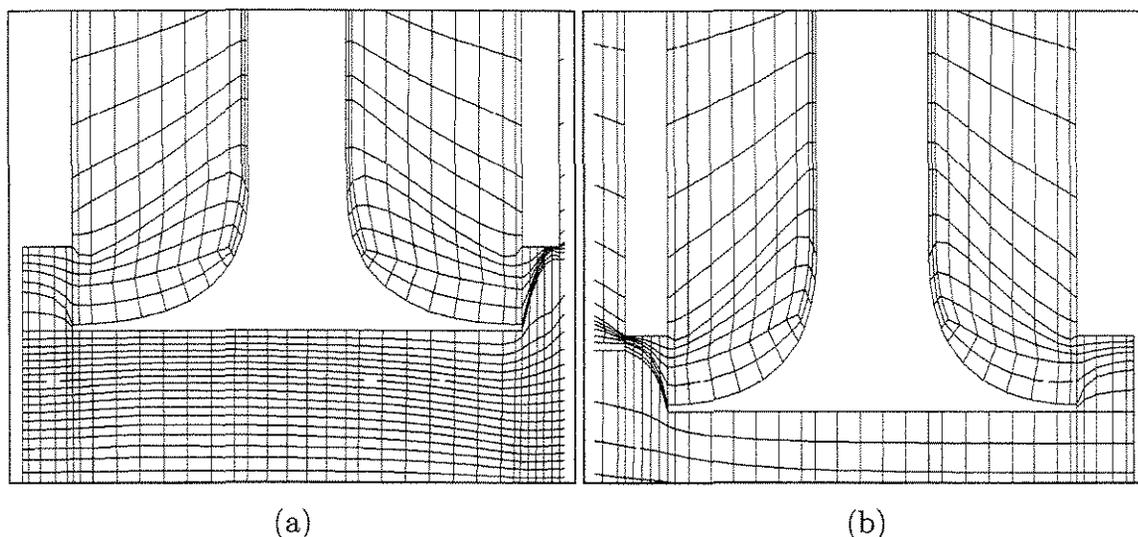


Figura 5.7: Movimentação das válvulas: (a) válvula de admissão; (b) válvula de exaustão.

Evidenciam-se nas Figuras 5.7(a) e 5.7(b) que há uma deformação inevitável dos elementos próximos às válvulas, porém todo o estudo anterior para encontrar um grid compatível para este trabalho levou em conta que esta situação ocorreria de qualquer maneira. O código consegue suportar e resolver elementos distorcidos até um certo limite, e os elementos distorcidos presentes neste grid encontram-se dentro deste limite suportado pelo software.

O modelo de turbulência utilizado nos cálculos foi o  $k-\varepsilon$  padrão, originalmente desenvolvido por LAUNDER e SPALDING (1974), por se tratar de um modelo típico e versátil para este tipo de aplicação. A simulação é toda transiente com 2 iterações por passo de tempo e o esquema de interpolação utilizado foi o LPS modificado.

Elaboraram-se metodologias para automatizar todas as etapas da simulação. Inicialmente funções foram criadas para que o usuário somente entrasse com a rotação do motor desejada e em quantos passos de tempo a simulação seria conduzida. Todos os estudos deste trabalho foram focados para um motor trabalhando a 2000 rotações por minuto (RPM) e soluções obtidas para 3000 passos de tempo de integração para a grande maioria dos casos, concretizando 882 graus do virabrequim, um pouco menos dos 900 graus propostos inicialmente.

## 5.5 Estudos de Caso

Neste trabalho, dois combustíveis foram avaliados, o metano e o heptano. Enquanto que para o metano duas abordagens reacionais foram analisadas, uma de simples etapa e outra de duas etapas de reação, o heptano traz uma abordagem de quatro etapas de reação. A seguir, apresenta-se cada estudo de caso e as propostas de simulação para cada combustível.

### 5.5.1 Caso 1: Metano – Simples Etapa de Reação

Este mecanismo de reação é o mais simplificado possível e foi extraído a partir do trabalho de WESTBROOK e DRYER (1981), o qual, entre outros, estudou o seguinte mecanismo de reação irreversível para a oxidação de metano:

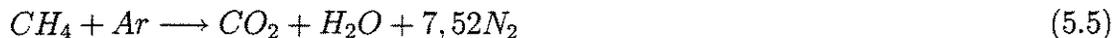


Nota-se que esta simples etapa de reação envolve a oxidação total de combustível metano convertendo a dióxido de carbono e água. Os parâmetros cinéticos levantados pelos autores não serão apresentados. As propriedades físicas destes componentes estão implementadas em uma biblioteca de propriedades no pacote CFX-TASCflow<sup>TM</sup> e também não serão apresentadas.

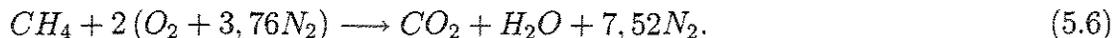
A razão de equivalência, ( $\Phi$ ), é definida como a razão entre a mistura ar/combustível real e a mistura ar/combustível estequiométrica (teórica) da reação (PERRY'S, 1998). Em termos de fração mássica ( $Y$ ), a razão de equivalência fica:

$$\Phi = \frac{Y_{comb}/Y_{Ar}}{(Y_{comb}/Y_{Ar})_{estequiométrico}} \quad (5.4)$$

em que  $Y_{Ar}$  e  $Y_{comb}$  são as frações mássicas do ar/combustível, respectivamente. Para o cálculo da relação ar/combustível da equação (5.3) é necessário levar em conta a presença do  $N_2$ , espécie inerte na reação. Portanto, a equação (5.3) pode ser escrita como:



que é análoga a seguinte equação:



A equação acima é escrita em base molar, assim, para cada *gmol* de  $O_2$  presente no ar há aproximadamente 3,76 *gmol* de  $N_2$  presentes neste gás. Portanto, para queimar 100 *gmol* é necessário multiplicar à esta base de cálculo o peso molecular ( $PM$ ) de cada espécie química. Conseqüentemente:

$$100 \text{gmol} \cdot PM_{CH_4} + 100 \text{gmol} \cdot 2 (PM_{O_2} + 3,76 PM_{N_2}) \longrightarrow \{ . . . \}$$

$$100 \text{gmol} \cdot 16 \text{g/gmol} + 100 \text{gmol} \cdot 2 (32 \text{g/gmol} + 3,76 \text{g/gmol}) \longrightarrow \{ . . . \}$$

$$1,6 \text{kg} + (6,4 \text{kg} + 21,056 \text{kg}) \longrightarrow \{ . . . \}.$$

Para obter  $Y_{comb}$  faz-se:

$$Y_{comb} = \frac{1,6}{1,6 + 6,4 + 21,056} \approx 0,055 = 5,5\%$$

Sabe-se que  $Y_{Ar} = 1 - Y_{comb}$ , valor facilmente calculado. Para calcular  $Y_{O_2}$ , realiza-se procedimento análogo:

$$Y_{O_2} = \frac{6,4}{1,6 + 6,4 + 21,056} \approx 0,22 = 22\%$$

Portanto, para obter-se  $\Phi = 1$ , são necessários aproximadamente 1,6 *kg* de metano para 27,5 *kg* de ar. Para  $\Phi = 0,5$ , é necessário diminuir à metade a quantidade mássica de combustível, mantendo porém a quantidade de ar, isto quer dizer que está trabalhando-se com oxigênio em excesso, condição facilmente visualizada nos motores da atualidade. Valores de  $\Phi > 1$  indicam que combustível em excesso está sendo lançado no meio reacional.

Tendo em base estes conceitos, propõem-se os seguintes estudos de caso para avaliação deste mecanismo de reação de simples etapa. A Tabela 5.5 apresenta as variações propostas e as concentrações dos reagentes na entrada da câmara de combustão.

É perceptível, a partir da Tabela 5.5, a proposta de avaliar variáveis importantes como pressão, temperatura e composição das espécies químicas presentes na equação 5.3 a partir da variação de  $\Phi$  para ambas malhas numéricas comentadas na seção 5.4 (pg. 58).

A quarta coluna da Tabela 5.5 informa se a mistura reacional será submetida a uma ignição ou não. Portanto, almeja-se com os casos 1.d e 1.h estudar a influência da malha numérica, sobre as variáveis de interesse, com um motor trabalhando a frio e de composição estequiometricamente correta.

Caso	$\Phi$	Malha	Reação?	$Y_{CH_4}$	$Y_{O_2}$
1.a	0,5	A	Sim	2,83%	22,65%
1.b	1,0	A	Sim	5,50%	22,00%
1.c	2,0	A	Sim	10,44%	20,88%
1.d	1,0	A	Não	5,50%	22,00%
1.e	0,5	B	Sim	2,83%	22,65%
1.f	1,0	B	Sim	5,50%	22,00%
1.g	2,0	B	Sim	10,44%	20,88%
1.h	1,0	B	Não	5,50%	22,00%

Tabela 5.5: Proposta de simulações para o caso 1.

As últimas duas colunas relacionam as composições na entrada da câmara de combustão no estágio de admissão de fluido. Estas composições são constantes e retratam uma composição mássica desta mistura homogênea de espécies químicas. Salienta-se que para este caso, quatro equações de transporte na mesma forma da equação 3.53 (pg. 31) são resolvidas para as espécies  $CH_4$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$  e  $H_2O$ . Como o  $N_2$  age como um componente de restrição, para este caso, há 5 espécies químicas e 4 equações de transporte, logo, para encontrar sua composição mássica o pacote computacional utiliza a seguinte relação:

$$Y_{N_2} = 1 - \sum_i Y_i$$

### 5.5.2 Caso 2: Metano – Duas Etapas de Reação

Extraído do mesmo trabalho de WESTBROOK e DRYER (1981) este mecanismo apresenta uma etapa de oxidação parcial de metano, gerando monóxido de carbono, e uma equação extra da oxidação total deste monóxido dando origem a dióxido de carbono. O mecanismo de reação é apresentado abaixo:



Em seu trabalho, os autores também regrediram alguns parâmetros cinéticos para este mecanismo. Eles comentam que apesar da flexibilidade de uma simples etapa poder reproduzir velocidades de queima sob uma gama muito grande de condições

operacionais, há falhas deste arranjo simplificado que podem comprometer os estudos de certas aplicações. Um destes fatores é o calor total de reação, sobrepredito para este mecanismo. Conseqüentemente, os pesquisadores resolveram dividir o mecanismo de reação para tentar aliviar este efeito de sobrepredição.

Apesar de possuir duas etapas este arranjo possui mecanismo global de reação exatamente igual a equação (5.3). Assim, a mesma avaliação de parâmetros para o Caso 1 é proposta para este caso. Portanto, a Tabela 5.6 traz as simulações a serem realizadas neste estudo de caso.

Caso	$\Phi$	Malha	Reação?	$Y_{CH_4}$	$Y_{O_2}$
2.a	0,5	A	Sim	2,83%	22,65%
2.b	1,0	A	Sim	5,50%	22,00%
2.c	2,0	A	Sim	10,44%	20,88%
2.d	1,0	A	Não	5,50%	22,00%
2.e	0,5	B	Sim	2,83%	22,65%
2.f	1,0	B	Sim	5,50%	22,00%
2.g	2,0	B	Sim	10,44%	20,88%
2.h	1,0	B	Não	5,50%	22,00%

Tabela 5.6: Proposta de simulações para o caso 2.

Mais uma vez omitem-se os parâmetros cinéticos, visto que trabalhar-se-á com a taxa de reação em função de parâmetros turbulentos do modelo de dissipação Eddy(EDM). Nota-se a partir da Tabela 5.6, que as composições de entrada são as mesmas do Caso 1, então espera-se discernir as divergências numéricas entre ambos mecanismos de reação.

### 5.5.3 Caso 3: Heptano – Quatro Etapas de Reação

No trabalho de HAUTMAN *et al.* (1981), extensivos resultados experimentais foram obtidos na oxidação de muitos hidrocarbonetos alifáticos, submetidos a altas temperaturas, nos estudos cinéticos de escoamentos reativos. Seus avanços indicaram a viabilidade deste complexo estudo apenas em um esquema cinético geral o qual pudesse prever com acurácia a maioria das espécies relevantes formadas durante processos de combustão. O mecanismo geral de quatro etapas, em sua forma generalizada, é

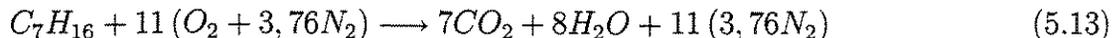
apresentado nas equações a seguir:



O termo  $n$ , na equação (5.9), refere-se ao número de carbonos na cadeia alifática. Na mesma equação percebe-se que um alcano reduz-se a eteno, uma etapa endotérmica, e este subproduto é oxidado gerando monóxido de carbono e hidrogênio, primeira etapa exotérmica, equação (5.10). As duas etapas restantes e exotérmicas produzem o dióxido de carbono e água a partir de subprodutos formados nas duas primeiras etapas de reação.

O pacote CFX-TASCflow<sup>TM</sup> traz consigo uma série de espécies químicas em que o usuário pode livremente escolher os componentes envolvidos e montar reações químicas conforme desejado. Para tentar prever o comportamento de uma gasolina, por exemplo, aliado com as espécies químicas previamente implementadas no pacote, optou-se pelo estudo do heptano ( $C_7H_{16}$ ), o qual está presente neste combustível e pode satisfatoriamente reproduzir os fenômenos encontrados na combustão desta gasolina.

Portanto, rearranjando as etapas de reação, apresenta-se o mecanismo global, em base molar, deste esquema geral em termos de  $C_7H_{16}$  com a inclusão do componente inerte,  $N_2$ :



Através de procedimento análogo ao Caso 1, e a partir da equação (5.13), pode-se chegar às composições de entrada para o heptano e oxigênio. Quanto às demais espécies químicas, estas são calculadas via equação de transporte. Uma vez que existem oito espécies químicas neste mecanismo, sete equações de transporte serão necessárias para resolver cada composto, com exceção ao  $N_2$ , o qual é obtido a partir da relação comentada anteriormente. Assim, a Tabela 5.7 apresenta as variações da razão de equivalência e concentrações de entrada dos reagentes na câmara de combustão.

Caso	$\Phi$	Malha	Reação?	$Y_{C_7H_{16}}$	$Y_{O_2}$
3.a	0,5	A	Sim	3,20%	22,56%
3.b	1,0	A	Sim	6,21%	21,86%
3.c	2,0	A	Sim	11,69%	20,58%
3.d	1,0	A	Não	6,21%	21,86%
3.e	0,5	B	Sim	3,20%	22,56%
3.f	1,0	B	Sim	6,21%	21,86%
3.g	2,0	B	Sim	11,69%	20,58%
3.h	1,0	B	Não	6,21%	21,86%

Tabela 5.7: Proposta de simulações para o caso 3.

## 5.6 Manipulação da Combustão

Sabe-se que alguns motores à combustão interna necessitam de uma perturbação externa para iniciar a queima da mistura. Isto depende diretamente do combustível utilizado. Um exemplo típico é o diesel, que possui a propriedade de auto-ignição quando submetido a uma certa pressão. Já os motores a gasolina e a álcool necessariamente necessitam de uma fonte externa de energia para iniciar sua ignição. Esta classe de motores é conhecida por possuírem ignição por faísca e esta faísca é geralmente gerada a partir de uma vela de ignição instalada no cilindro.

Para representar a ignição do meio reacional, o modelo EDM é utilizado com a manipulação de constantes da taxa de reação, conforme equação (3.55), rerepresentada abaixo.

$$R_{k,edm} = -A_{ebu}\rho\frac{\varepsilon}{k}\min\left\{Y_f, \frac{Y_o}{r_k}, B_{ebu}\frac{Y_p}{1+r_f}\right\}$$

Os valores padrões para  $A_{ebu}$  e  $B_{ebu}$  são 4,0 e 0,5 respectivamente. Estes valores padrões servem para qualquer escoamento e somente necessitam modificação caso houver necessidade. Do jeito em que está implementado o modelo, assim que a mistura multi-componente entra no meio reacional esta já começa a reagir consumindo os reagentes e formando os produtos da reação, uma vez que a taxa também é função de parâmetros turbulentos do escoamento.

Em um motor à combustão interna há a necessidade de impedir que esta mistura venha a reagir antes da ignição. Experiências prévias com este modelo, neste trabalho, indicaram a facilidade de impedir que a reação ocorra pela simples modificação

da constante  $A_{ebu}$  do modelo, ou seja, se  $A_{ebu} = 0$ , logo  $R_{k,edm} = 0$ , e portanto, não haverá reação. O problema é que simplesmente atribuindo novamente à constante seu valor original não indica que a reação ocorrerá automaticamente, isto é, faz-se necessário um novo distúrbio na expressão da taxa de reação para que ocorra uma espécie de ignição da mistura. Isto pôde ser obtido pela manipulação da constante  $B_{ebu}$ .

O termo  $\min \left\{ Y_f, \frac{Y_o}{r_k}, B_{ebu} \frac{Y_p}{1+r_f} \right\}$  funciona como um limitante na formação de produtos e sempre terá valores positivos em sua forma padrão. O distúrbio comentado anteriormente é trocar o sinal da constante  $B_{ebu}$  fazendo com que o termo  $B_{ebu} \frac{Y_p}{1+r_f}$  fique negativo e seja multiplicado pela parcela  $-A_{ebu} \rho \frac{\varepsilon}{k}$ , tornando-se uma taxa finita e positiva. A consequência disto é a formação imediata e descontrolada da chama em todos os pontos do domínio computacional, podendo haver regiões de temperatura muito elevadas.

É evidente que esta estratégia de troca do sinal da constante  $B_{ebu}$  é um artifício puramente matemático e que pode trazer consequências desagradáveis na simulação. Entretanto, inúmeros testes foram realizados e não foram observados maiores problemas numéricos, salvo algumas dificuldades de convergência a serem comentadas mais adiante.

Portanto,  $B_{ebu}$  será igual a  $-1$  no instante de ignição, o qual dura  $10^\circ$  de ângulo de virabrequim. Neste exato instante de ignição, simultaneamente,  $A_{ebu}$  volta a seu valor padrão,  $4,0$ , formando a chama e propagando-a pela câmara de combustão. Ao final da ignição  $B_{ebu}$  também retorna a seu valor original,  $0,5$ . Salienta-se que para cada reação, há a necessidade de modificação destas constantes, então modificam-se as constantes  $A_{ebu}$  e  $B_{ebu}$  para todas as reações presentes no escoamento. A estratégia da combustão a partir de manipulação das constantes é resumida na Tabela 5.8.

Ângulo do Virabrequim	$A_{ebu}$	$B_{ebu}$
$0 < \theta \leq 540$	0,0	0,5
$540 < \theta < 550$	4,0	-1,0
$550 \leq \theta \leq 882$	4,0	0,5

Tabela 5.8: Manipulação das constantes do modelo EDM ao longo da simulação.

# Capítulo 6

## Resultados e Discussões

Neste capítulo serão apresentados e discutidos os resultados obtidos com as simulações do escoamento compressível na câmara de combustão do motor FIAT Palio 1.0, objeto de estudo desta investigação científica. Conforme comentado anteriormente, meses de trabalho foram gastos entre adequação da geometria e a perfeita interação da dinâmica do conjunto pistão/válvulas. Para cada grid numérico testado foi necessário realizar uma operação em ordem gradativa. Primeiro ajustava-se a movimentação do grid via sub-rotina em linguagem Fortran, e então, após esta primeira e exaustiva etapa, se partia para o escoamento, a princípio incompressível e turbulento, para então introduzir a compressibilidade no meio fluido. No decorrer deste capítulo, várias dificuldades e todas as hipóteses simplificadoras utilizadas neste trabalho serão comentadas.

Primeiramente, apresentam-se resultados referentes a uma simulação mono-componente, ou seja, somente ar e sem combustão. Comentar-se-á detalhes do escoamento com gráficos de vetores e alguns gráficos de contorno, como temperatura e pressão, em alguns instantes da simulação. Em seguida, de maneira sucinta e quantitativa, os resultados referentes aos três estudos de caso propostos na Seção 5.5 serão avaliados, discutidos e comparados. Todas as simulações dos estudos de caso propostos são monofásicas multi-componente, transientes, turbulentas, reativas e com transferência de calor.

### 6.1 Simulação Monofásica Mono-componente

Antes de dar início aos resultados para as espécies químicas estudadas neste trabalho científico, apresentam-se alguns resultados do mesmo objeto de estudo, porém focando o

aspecto qualitativo, ou seja, apresentam-se alguns gráficos vetoriais nos diversos estágios do motor, e ainda, alguns mapas de iso-superfície de pressão e temperatura.

O fluido monofásico e mono-componente é o ar nas condições padrões (CNTP) e o escoamento é compressível, turbulento e com transferência de calor. Os mapas de iso-superfície envolvendo a temperatura e pressão possuem legendas nas seguintes unidades,  $[^{\circ}C]$  e  $[bar]$ , respectivamente, e a legenda do vetor velocidade possui dimensão de  $[m/s]$ .

### 6.1.1 Primeira Exaustão

Já discutido antes, a inclusão da primeira exaustão na simulação é uma estratégia para captar os efeitos do ângulo de cruzamento, instante em que as duas válvulas encontram-se simultaneamente abertas. Assim, a Figura 6.1 apresenta um mapa vetorial neste primeiro estágio de exaustão.

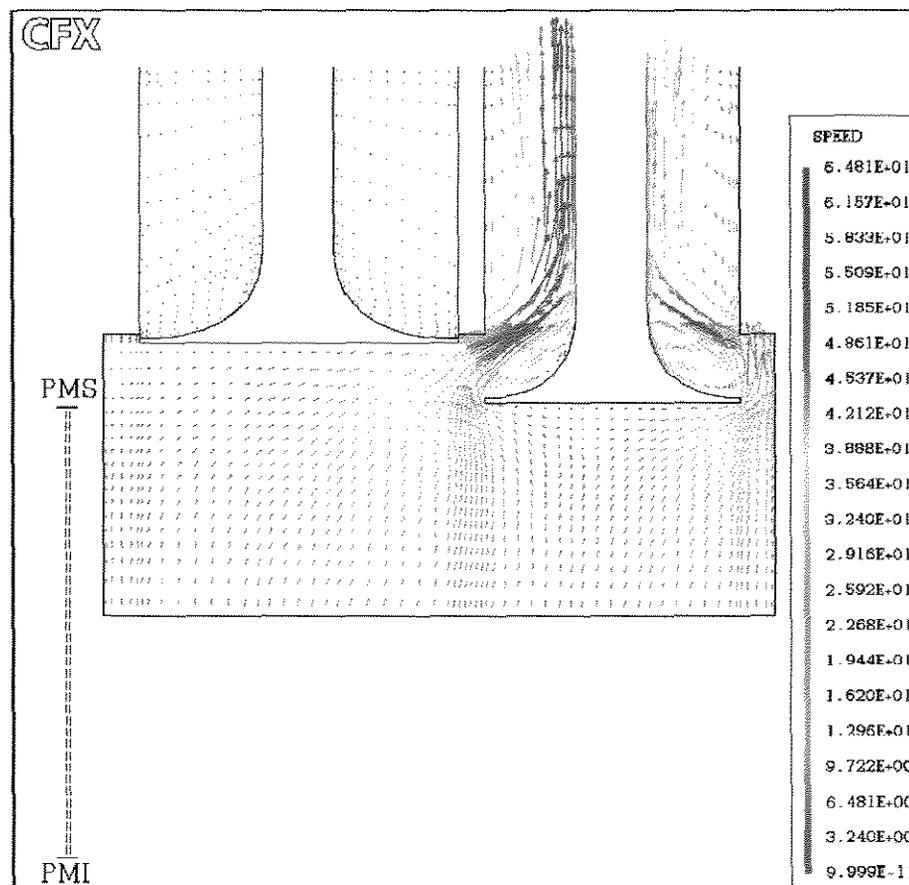


Figura 6.1: Mapa vetorial no instante de primeira exaustão.

Da Figura 6.1, PMS e PMI são os pontos mortos superior e inferior do pistão, respectivamente. É visível que o fluido é forçado a escoar pelo canal de descarga, uma vez que o pistão está em movimento ascendente e a única condição de contorno livre para passagem é esta descarga, fixada à pressão ambiente,  $1,01325\text{bar}$ , fazendo com que o fluido saia do domínio computacional. A seguir, enquanto a Figura 6.2(a) apresenta o campo de pressão, a Figura 6.2(b) apresenta o campo de temperatura, em um determinado instante de tempo, exatamente em  $85^\circ$  de ângulo do virabrequim.

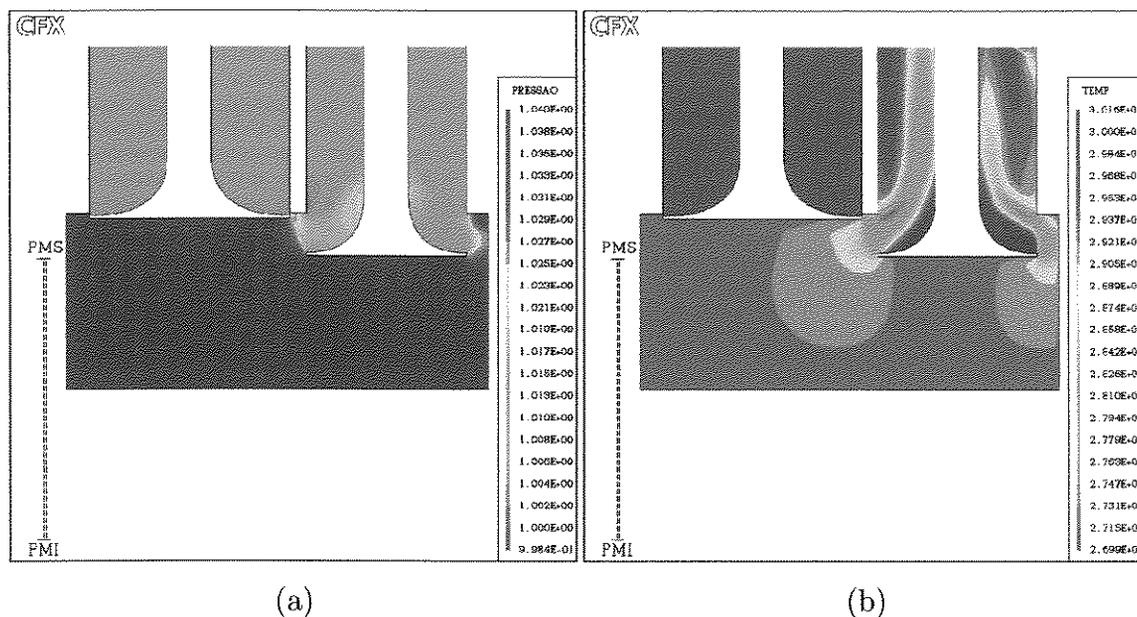


Figura 6.2: Iso-superfícies na primeira exaustão: (a) pressão; (b) temperatura.

A Figura 6.2(a) explica o porquê dos vetores da Figura 6.1 estarem assintóticos em deixar o domínio. Com o deslocamento ascendente do pistão, o cilindro começa a pressurizar levemente e, por este pequeno aumento do gradiente de pressão, o fluido escoar. Pela legenda, percebe-se que este leve gradiente de pressão é da ordem de  $40\text{mbar}$  (valor superior menos o valor inferior da legenda). A região em azul, qualitativamente a de menor pressão, ocorre em virtude de uma alta velocidade de escoamento próxima à válvula, fazendo com que uma recirculação de fluido ocorra nesta região, baixando a pressão localmente. Na Figura 6.2(b), pouca variação de temperatura é perceptível, na ordem de  $3^\circ\text{C}$ . É importante salientar que neste instante a válvula de admissão está totalmente fechada. Os valores nodais nesta região de admissão de fluido são exatamente os mesmos das estimativas iniciais, de  $1,01325\text{bar}$  e  $27^\circ\text{C}$ .

## 6.1.2 Ângulo de Cruzamento

Este é o instante em que as duas válvulas movimentam-se simultaneamente. Na prática, isto de fato acontece e sempre um pouco de combustível, pronto a ser admitido, acaba sendo extraviado em função de ser arrastado via canal de descarga. Ou então, ocorre o efeito inverso, os gases de combustão ainda não exauridos pela descarga são rearmastados para dentro do cilindro, pois neste instante o pistão reverte sua direção e começa a caminhar em sentido descendente criando uma depressão na câmara de combustão. Esta simulação captou este último fenômeno e a Figura 6.3 apresenta em forma vetorial um instante deste ângulo de cruzamento, exatamente em 203° do virabrequim.

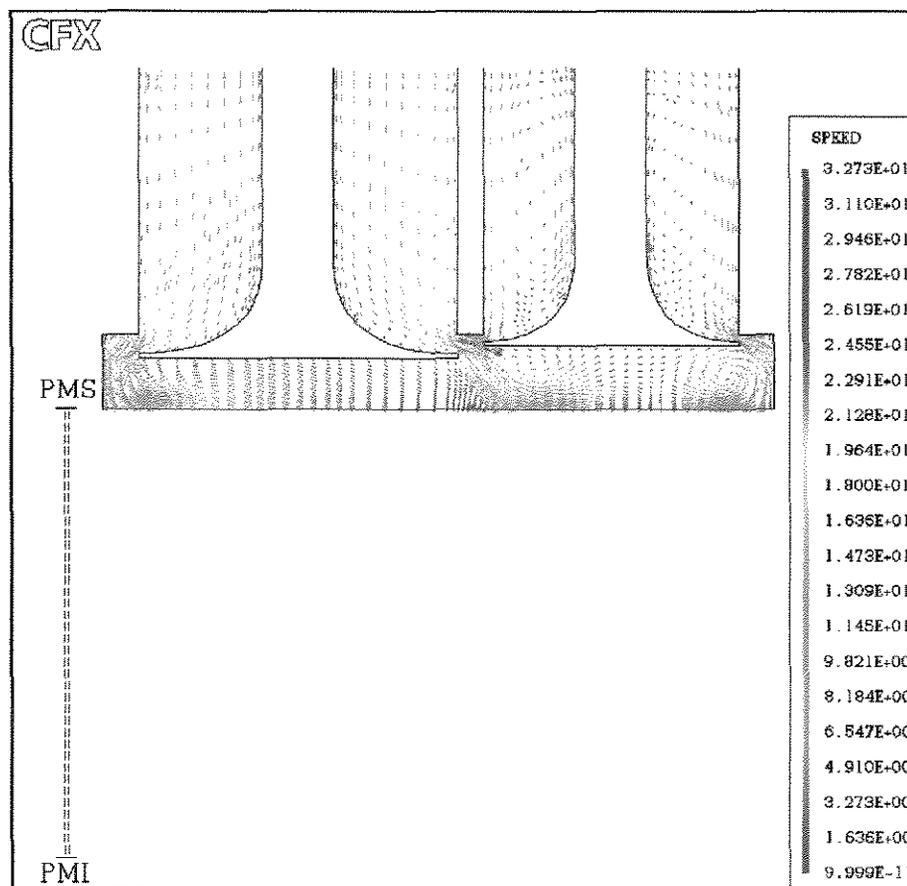


Figura 6.3: Mapa vetorial no ângulo de cruzamento.

Nota-se pela Figura 6.3 que ocorre a admissão de fluido via válvula de admissão e uma reversão de escoamento no canal de descarga, ou seja, o fluido é reinjetado pelo duto de exaustão. Nesta região, o fluido, supostamente gases de combustão, está sendo rearmastado para o cilindro em virtude da despressurização do domínio, afinal o pistão está em sentido descendente. Percebe-se ainda que o pistão está muito próximo de

seu ponto morto superior(PMS). Neste instante a válvula de admissão está em sentido descendente(abrindo), enquanto a válvula de escape está prestes a fechar, ou seja, em sentido ascendente. As Figuras 6.4(a) e 6.4(b) apresentam os campos de pressão e temperatura, respectivamente, no mesmo instante de tempo do mapa vetorial.

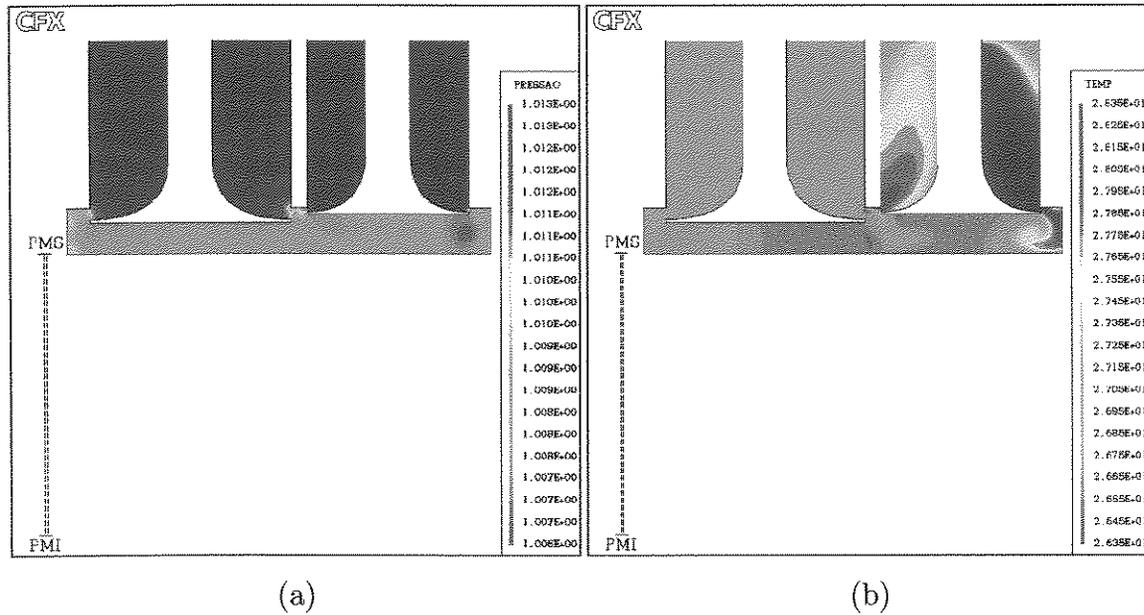


Figura 6.4: Iso-superfícies no ângulo de cruzamento: (a) pressão; (b) temperatura.

Pela Figura 6.4(a) percebe-se que a região de menor pressão é justamente a do cilindro, volume compressível da Figura 5.1, fazendo com que o fluido escoe para seu interior. Mais uma vez, não houve variação significativa da temperatura em todo o domínio computacional, conforme Figura 6.4(b). Nota-se novamente que os efeitos térmicos nestes instantes iniciais não são significativos, em virtude de uma condição de contorno de pressão e temperatura especificadas e inalteradas estarem presentes, tanto no estágio de primeira exaustão quanto neste ângulo de cruzamento, assim como no próximo estágio, a admissão de fluido.

### 6.1.3 Admissão de Fluido

Após este curto ângulo de cruzamento, sela-se totalmente a válvula de exaustão onde somente ocorre indução de ar pelo duto de entrada. Em um motor real, ocorre injeção da mistura ar/combustível para o interior do cilindro neste estágio. Uma noção do escoamento nesta etapa pode ser visualizada a partir da Figura 6.5 através de um mapa vetorial nos 273° de ângulo do virabrequim.

São nítidas as presenças de fortes zonas de recirculação de fluido, vórtices provocados tanto pelo gradiente de pressão quanto pelo arranjo curvo da tulipa da válvula de admissão. Estes vórtices podem ser comprovados por gráficos de iso-superfície a partir do mapeamento de pressão visualizado na Figura 6.6(a). A Figura 6.6(b) apresenta o campo de temperatura para este mesmo instante de tempo.

A partir do mapeamento de pressão neste estágio, começa-se a perceber o efeito da despressurização no cilindro em virtude do deslocamento descendente do pistão. Os vórtices previamente visualizados na Figura 6.5 são verdadeiras zonas de baixa pressão de fluido. Este efeito também acaba influenciando na temperatura, mesmo que este gradiente não seja assim tão significativo. Percebe-se ainda que a válvula de exaustão está fechada e neste exato instante a válvula de admissão encontra-se posicionada em seu ponto de máxima descendência(levantamento).

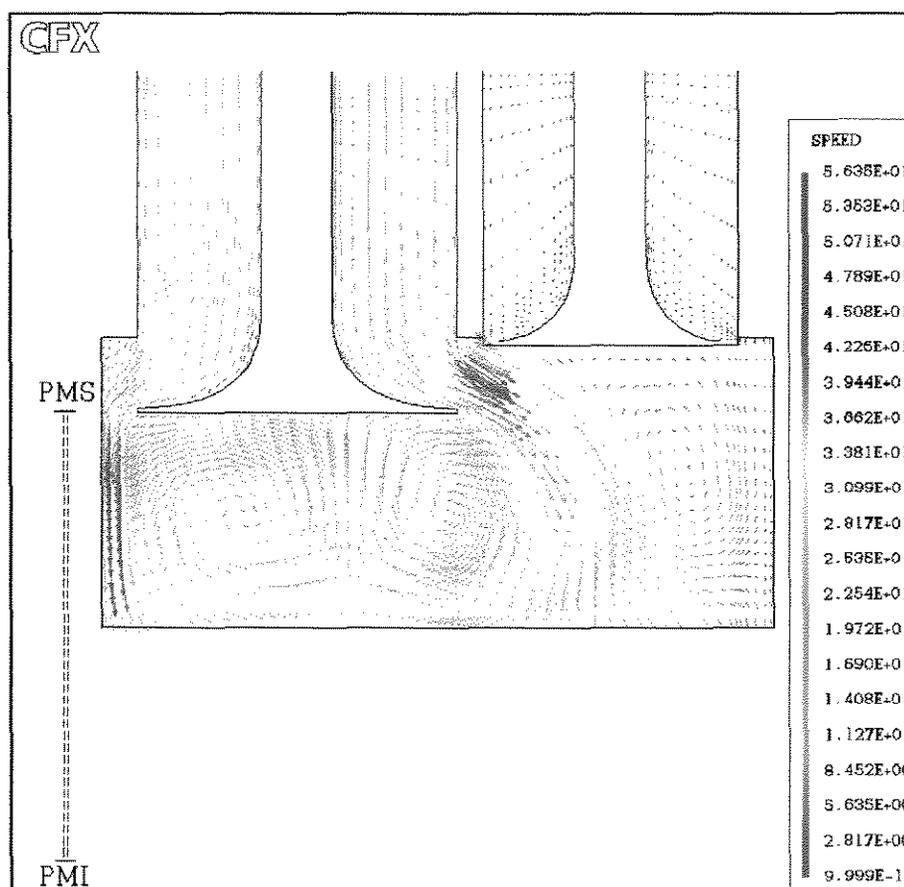
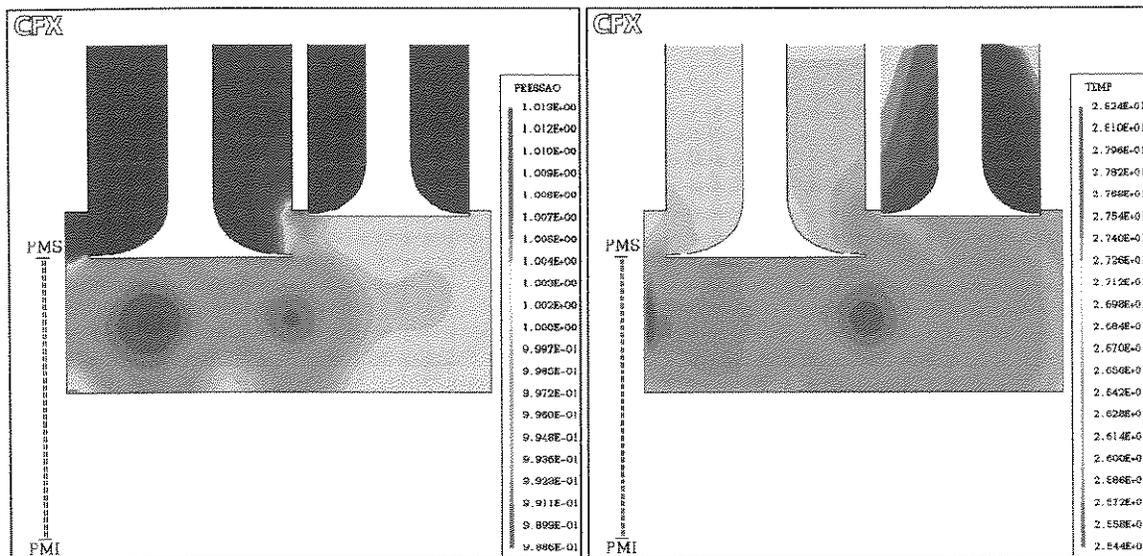


Figura 6.5: Mapa vetorial no estágio de admissão.



(a) (b)

Figura 6.6: Iso-superfícies no estágio de admissão: (a) pressão; (b) temperatura.

### 6.1.4 Compressão de Fluido

Uma vez encerrada a admissão de fluido, sela-se totalmente a válvula de admissão e em função do deslocamento ascendente do pistão, o cilindro começa a pressurizar. A Figura 6.7 apresenta o campo vetorial neste instante de máxima compressão.

A Figura 6.7 demonstra que o pistão está em seu ponto morto superior. Alguns vórtices locais ainda foram preservados do estágio de admissão. Nesta etapa, as velocidades pontuais são inferiores às velocidades das etapas anteriores, porém é neste estágio em que ocorrem os maiores gradientes de pressão e temperatura, em virtude da pressurização do sistema. Portanto, a Figura 6.8(a) apresenta o mapa de pressão enquanto que a Figura 6.8(b) apresenta o campo de temperatura proveniente desta pressurização.

Nota-se claramente que o nível de pressão chegou na ordem de pouco mais de *26bar*. O modelo compressível utilizado nestes cálculos é regido pela equação de estado dos gases ideais e o efeito deste aumento da pressão acaba refletindo na temperatura, a qual chegou a um pico próximo de  $490^{\circ}C$  neste instante. No próximo estágio, o de expansão, ocorrerá o efeito inverso, ou seja, o pistão reverte sua direção e se desloca em sentido descendente, baixando os níveis de pressão e temperatura.

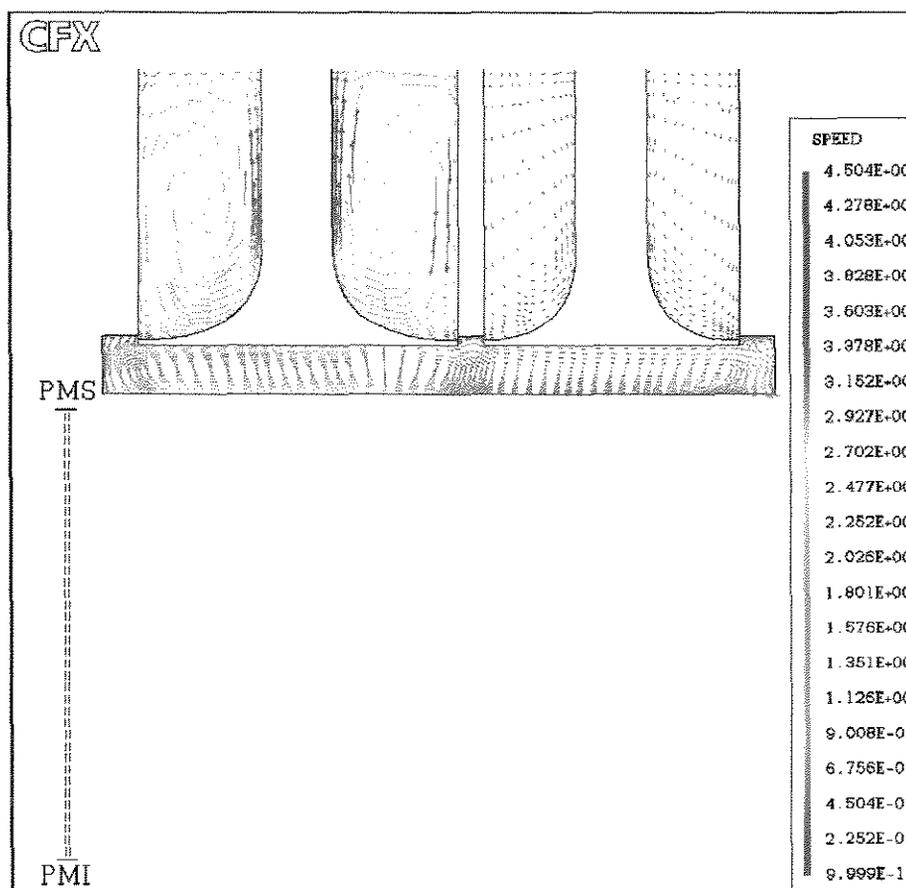


Figura 6.7: Mapa vetorial no estágio de máxima compressão.

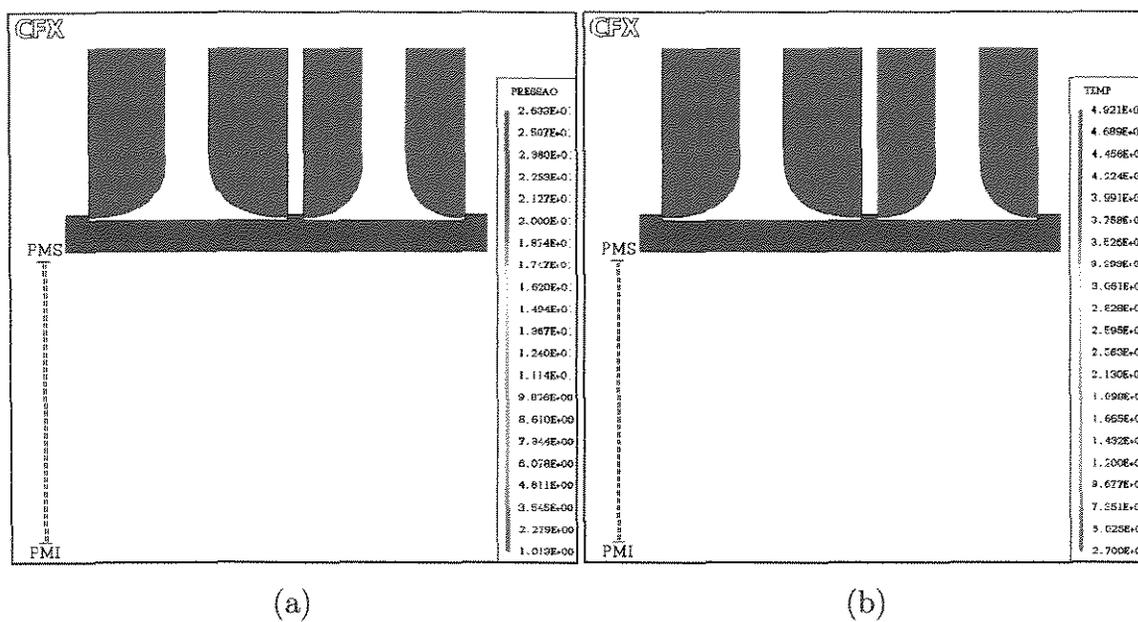


Figura 6.8: Iso-superfícies na máxima compressão: (a) pressão; (b) temperatura.

### 6.1.5 Expansão

Como já comentado anteriormente, este estágio é oriundo da ignição da mistura ar/com-bustível dando origem aos gases de combustão e liberando energia suficiente para deslocar o automóvel. A Figura 6.9 apresenta o campo vetorial, em um instante de máxima expansão, onde o pistão está localizado exatamente em seu ponto morto inferior.

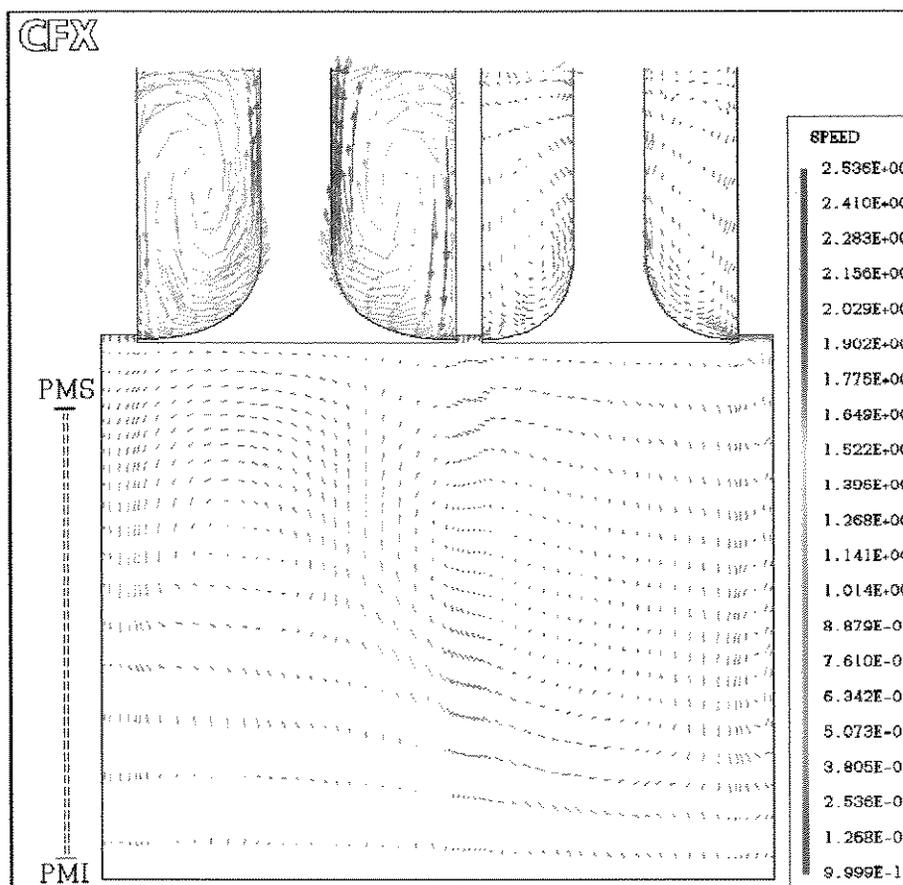


Figura 6.9: Mapa vetorial no estágio de máxima expansão.

As Figuras 6.10(a) e 6.10(b) apresentam o mapa de pressão e o campo de temperatura, respectivamente, para este mesmo estágio do motor. Percebe-se, através do mapa de pressão, que a pressão resultante interna no cilindro é menor que a pressão ambiente, atribuída nas condições de contorno. Isto acontece justamente porque há um atraso proposital do fechamento da válvula no estágio de admissão, característica de fábrica da grande maioria dos motores, fazendo com que a pressão resultante no estágio de expansão seja menor que a ambiente, em um motor trabalhando a frio, fato este que não ocorre em um motor trabalhando com combustão. Observa-se efeito semelhante

para a temperatura neste estágio.

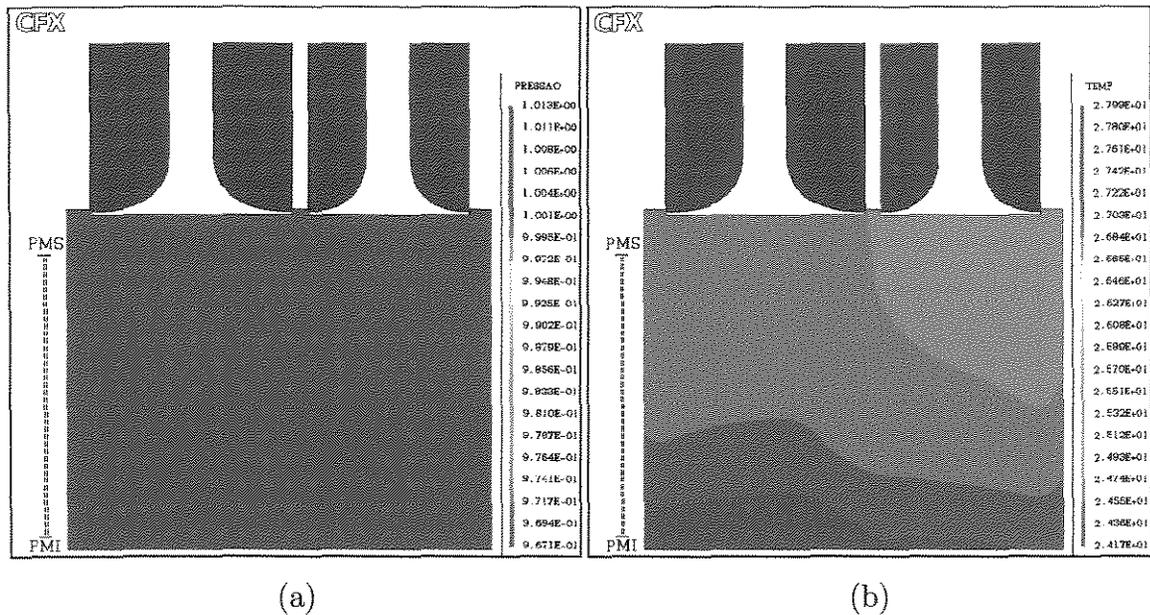


Figura 6.10: Iso-superfícies no estágio da expansão: (a) pressão; (b) temperatura.

### 6.1.6 Última Exaustão

A respeito da última exaustão, esta possui efeitos análogos à primeira, portanto não serão apresentados seus resultados na forma de gráficos vetoriais e iso-superfícies. Entretanto, salienta-se que este último estágio apresentou grandes problemas de convergência nas simulações com a introdução de combustível e sua subsequente ignição. Acredita-se que os fortes gradientes de pressão próximos à abertura das válvulas são os responsáveis por esta divergência numérica. Contudo, comenta-se que todos os casos envolvendo combustão não apresentarão o segundo estágio de exaustão em virtude desta fatalidade numérica.

## 6.2 Simulação Monofásica Multi-componente

A seguir, apresentam-se todos os resultados pertinentes aos três estudos de caso propostos na seção 5.5 (pg. 62) deste objeto de estudo. Os resultados serão apresentados e discutidos em forma de gráficos de linha e procurar-se-á demonstrar uma comparação entre estes casos, bem como toda discussão necessária para seus entendimentos.

### 6.2.1 Avaliação de Solução Independente entre as Malhas

Para cada estudo de caso proposto, avaliou-se a variação do parâmetro  $\Phi$ , vide Tabela 5.5, para duas malhas numéricas, *A* e *B*, em que suas distinções eram apenas na concentração do número de elementos. Após todos os estudos de caso simulados, partiu-se para o tratamento dos dados obtidos pela simulação. Este tópico tem como objetivo ilustrar a pouca influência dos resultados nas variáveis de interesse em função da concentração do grid numérico.

Para ilustrar esta fraca dependência, optou-se por dois estudos de caso, os casos 1.*d* e 1.*h*, que serão apresentados na forma de gráficos de linha em que apresentam-se as variáveis pressão e temperatura em função do ângulo do virabrequim. Primeiramente apresenta-se a pressão medida ao longo da simulação e sua comparação entre ambos grids, visualizado a partir da Figura 6.11.

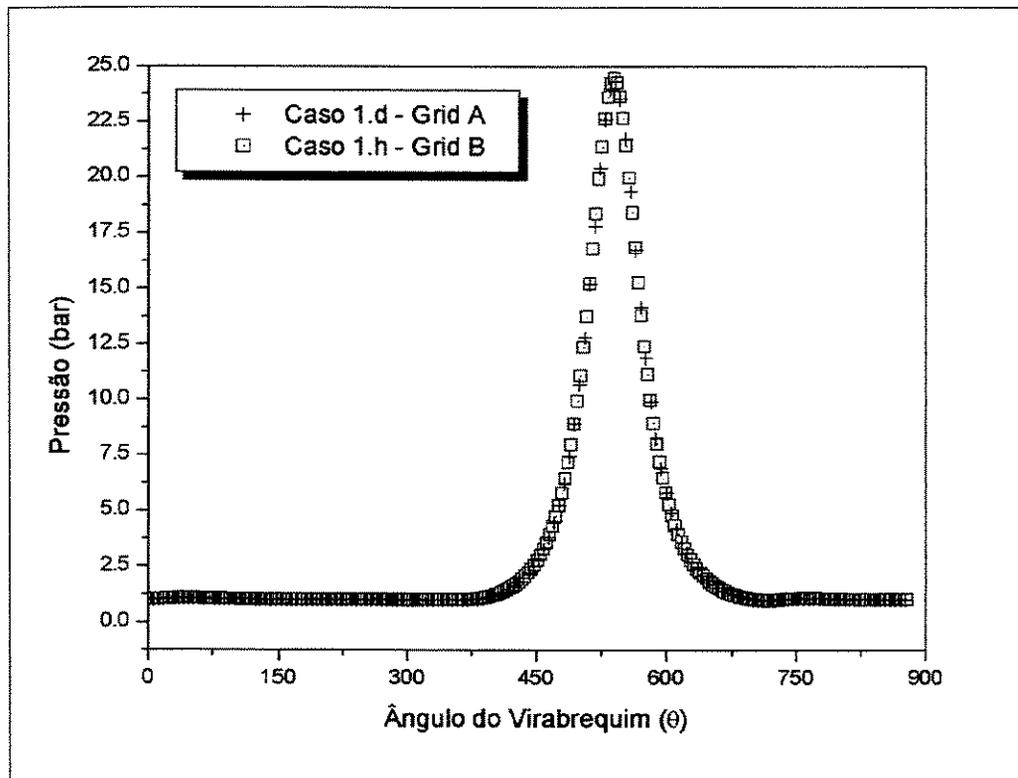


Figura 6.11: Independência da pressão em relação aos grids *A* e *B*.

Percebe-se pela Figura 6.11 que ambas pressões acompanham-se assintoticamente. Os casos 1.*d* e 1.*h* são característicos por possuírem  $\Phi = 1$  e não haver a etapa de combustão, portanto, nota-se que a simulação percorreu todos os 882° de virabrequim sem problemas de convergência numérica na simulação. Entretanto, salienta-se que,

enquanto o caso 1.d exigiu 3000 passos de integração no tempo e isto equivale a marchar  $0,29^\circ$  de ângulo de virabrequim,  $\theta$ , por passo de tempo. O caso 1.h exigiu 5000 passos de integração, ou seja,  $\Delta\theta = 0,17^\circ$  de marcha de integração.

A temperatura apresentou a mesma concordância entre os grids e nenhuma distinção numérica significativa pôde ser notada. A Figura 6.12 demonstra a temperatura média na base do pistão em função do ângulo do virabrequim para os casos 1.d e 1.h, os quais não ocorrem combustão.

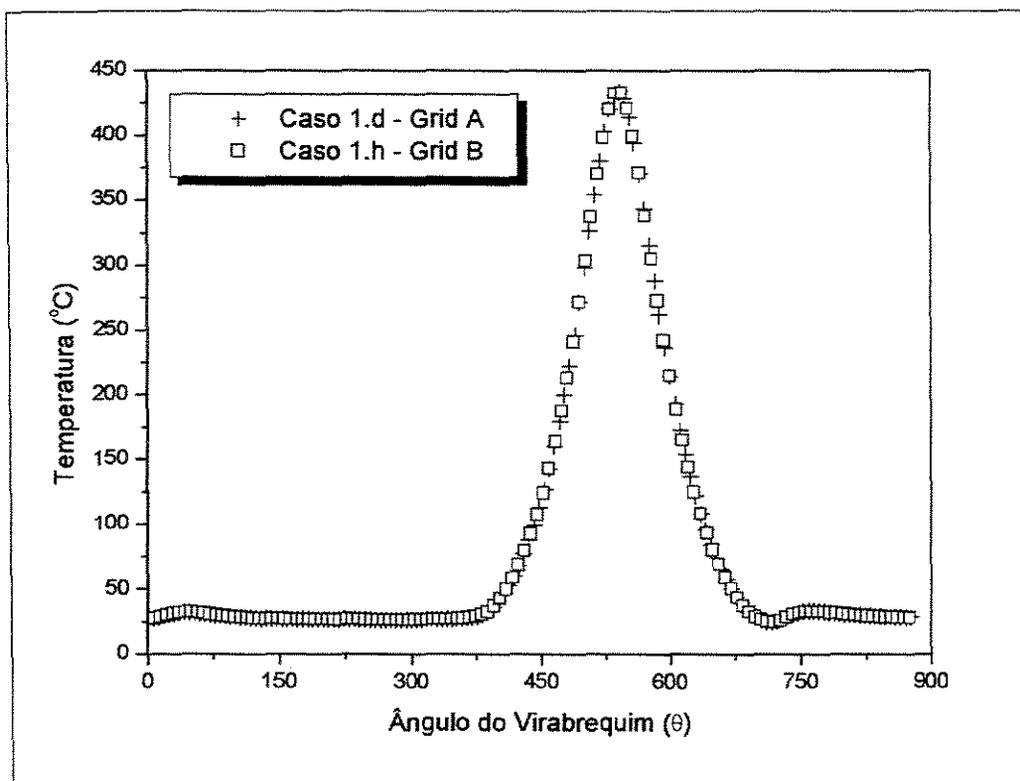


Figura 6.12: Independência da temperatura em relação aos grids *A* e *B*.

Ambas variáveis, pressão e temperatura, são médias aritméticas na base do pistão, em virtude da impossibilidade de se trabalhar com mecanismos mais precisos na realização de médias, como médias na área ou médias volumétricas. A sub-rotina utilizada para fazer o cálculo do deslocamento pistão em função do tempo somente fornecia a possibilidade de obter valores de quaisquer propriedades no nó corrente, facilitando assim a realização de um procedimento de média aritmética para estas variáveis. E pelo fato das médias destas propriedades estarem de acordo entre ambos os grids, isto é um bom indicativo que a concentração da malha numérica não foi um fator importante para estes estudos de caso. Assim sendo, os tópicos seguintes somente apresentarão os resultados numéricos obtidos pelo grid *A*.

## 6.2.2 Estudo de Caso 1

Conforme comentado na seção 5.5.1, página 62, ficou estabelecida a combustão de metano através de oxidação total por simples mecanismo de reação. As propostas de avaliação deste combustível foram exibidas na Tabela 5.5.

Há duas maneiras básicas de apresentar os resultados das variáveis pressão e temperatura. A primeira delas, e mais convencional, é apresentá-las em função do ângulo do virabrequim, em que fica fácil visualizar o comportamento das variáveis em função do estágio do motor, ou seja, nos mesmos moldes das Figuras 6.11 e 6.12. A outra maneira, mais técnica, é apresentá-las através de diagramas P-V e T-V, em que as variáveis são apresentadas em função do volume do cilindro. Apesar de mais técnica, esta ilustração pode parecer um pouco confusa, pois há estágios do motor em que não há mudança significativa da variável, e as linhas acabam se sobrepondo no gráfico. As Figuras 6.13 e 6.14 são exemplos típicos para compreensão desta forma de apresentação.

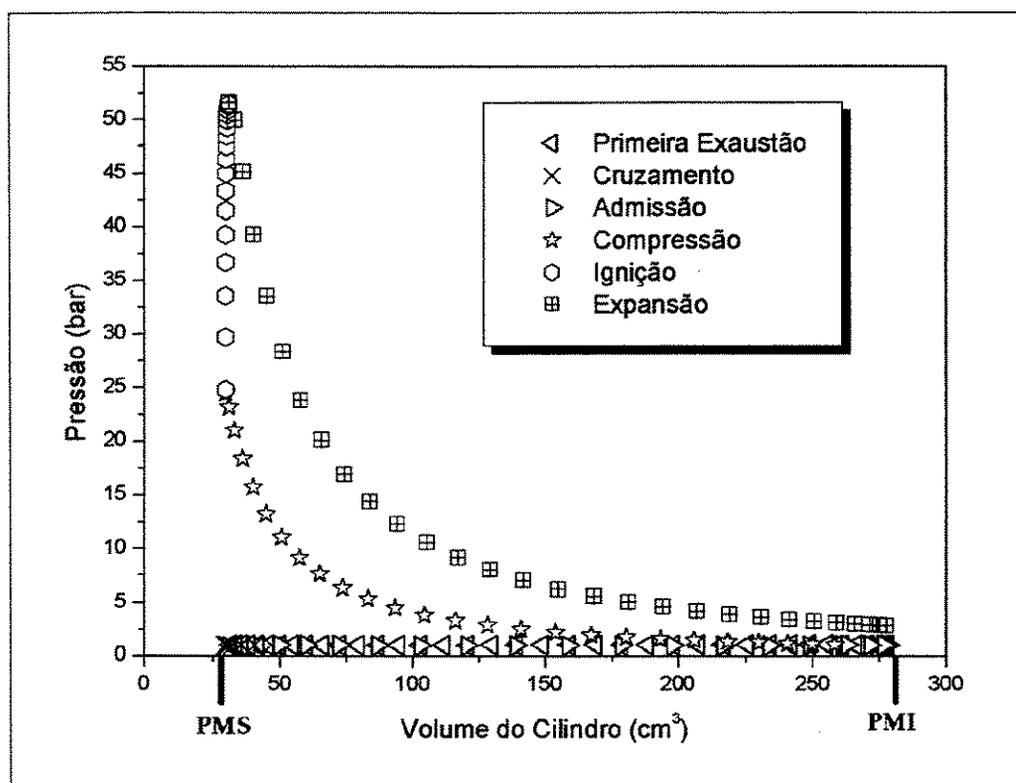


Figura 6.13: Estágios do motor em um diagrama do tipo P-V.

O diagrama pertinente a Figura 6.13 foi extraído dos resultados do caso 1.a. A abcissa representa o volume do cilindro nos mais diversos estágios do motor. De

condição inicial, o cilindro inicia no seu ponto morto inferior (PMI) e percorre a primeira exaustão para logo depois entrar no ângulo de cruzamento e admissão. Todos estes estágios estão sobrepostos na figura, uma vez que não há mudança da pressão no cilindro nestas etapas. A partir da compressão, é nítida a pressurização da câmara de combustão até alcançar o ponto morto superior, acontecendo em seguida a ignição da mistura ar/combustível, fazendo com que a pressão eleve bruscamente até pouco mais de 50bar. O estágio de expansão despressuriza o cilindro até alcançar o PMI e iniciar a segunda exaustão, etapa esta que não foi possível em nenhum caso com combustão, mesmo alterando variáveis de simulação como fatores de relaxação, passos de integração no tempo, entre outros.

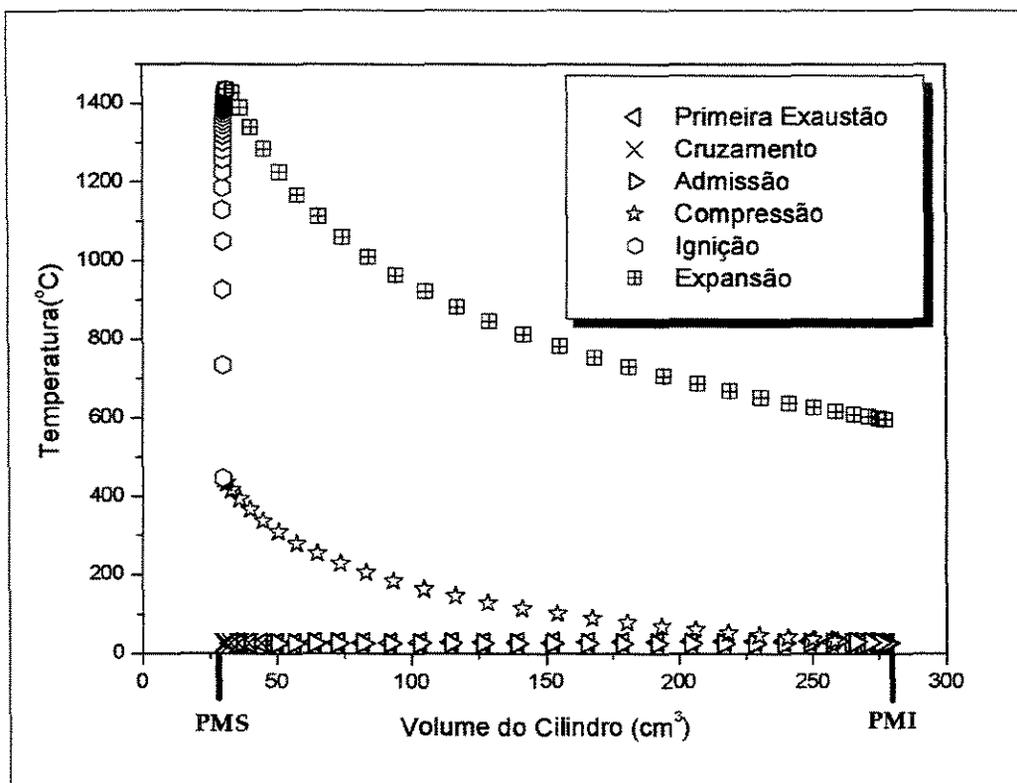


Figura 6.14: Estágios do motor em um diagrama do tipo T-V.

Nota-se pela Figura 6.14 que a temperatura sofre influência direta da pressão na câmara de combustão. Análogo ao diagrama P-V, Figura 6.13, a temperatura também acabou ficando sobreposta nos primeiros estágios do motor, ou seja, esta só começou a variar substancialmente no estágio de compressão, para então seguir seu caminho até a expansão. Notam-se ainda, níveis bem altos de temperatura no interior do motor, além da descontinuidade entre o final da expansão, pistão localizado no PMI, e a linha que deveria representar a última exaustão.

As Figuras 6.15 e 6.16 demonstram a variação da pressão através de um diagrama P-V, e outro em função do ângulo do virabrequim( $\theta$ ), respectivamente. A Figura 6.15 demonstra os picos de pressão em virtude da variação de  $\Phi$  para os casos 1.a, 1.b e 1.c, enquanto a Figura 6.16 demonstra quatro estudos de caso, 1.a, 1.b, 1.c e 1.d, tornando mais fácil a percepção da variação da pressão nos casos com e sem a combustão da mistura.

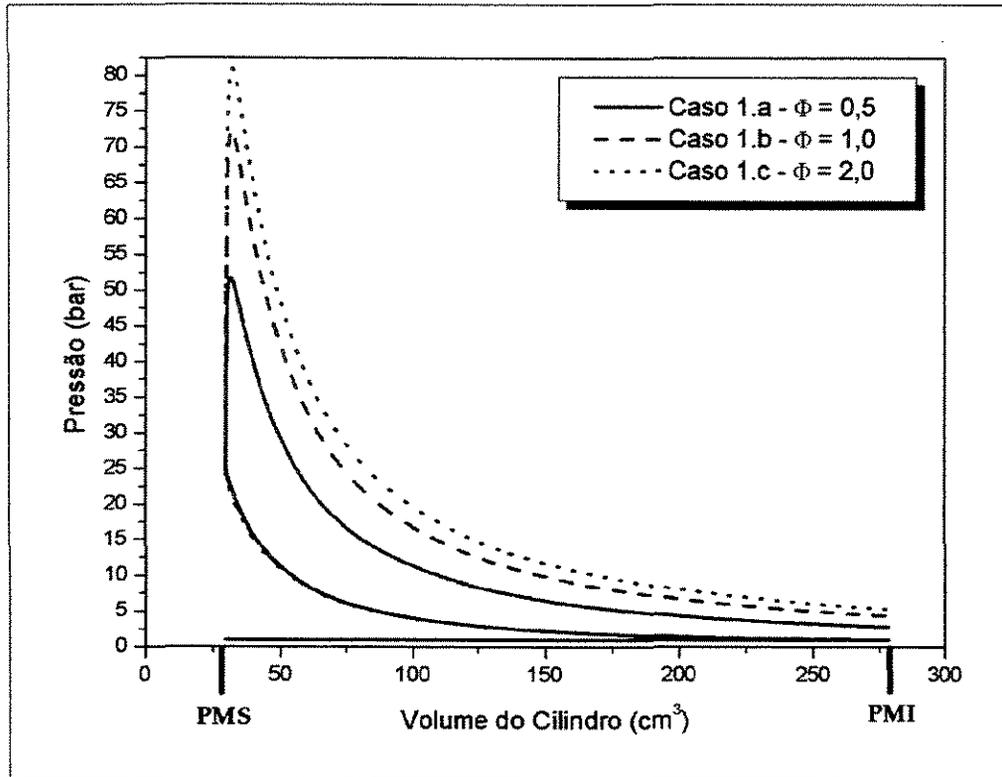


Figura 6.15: Diagrama P-V para o Caso 1.

É perceptível que os níveis de pressão dentro do cilindro estão elevadíssimos, em função da combustão da mistura reacional. Percebe-se ainda, a nítida diferença entre um caso sem reação, caso 1.d, e demais casos com reação na Figura 6.16, ou seja, o caso 1.d tem um pico de pressão um pouco maior que 20bar, enquanto o caso com menor concentração de combustível dentro da câmara,  $\Phi = 0,5$ , sua pressão alcança mais que o dobro do caso sem combustível, por volta de 52bar.

Espera-se que esses níveis de pressão atingidos para o Caso 1 refitam diretamente na temperatura dentro do cilindro. As Figuras seguintes, 6.17 e 6.18, esclarecem de maneira direta esta dependência da temperatura com a pressão.

A partir dos picos de temperatura atingidos para este primeiro estudo de caso,

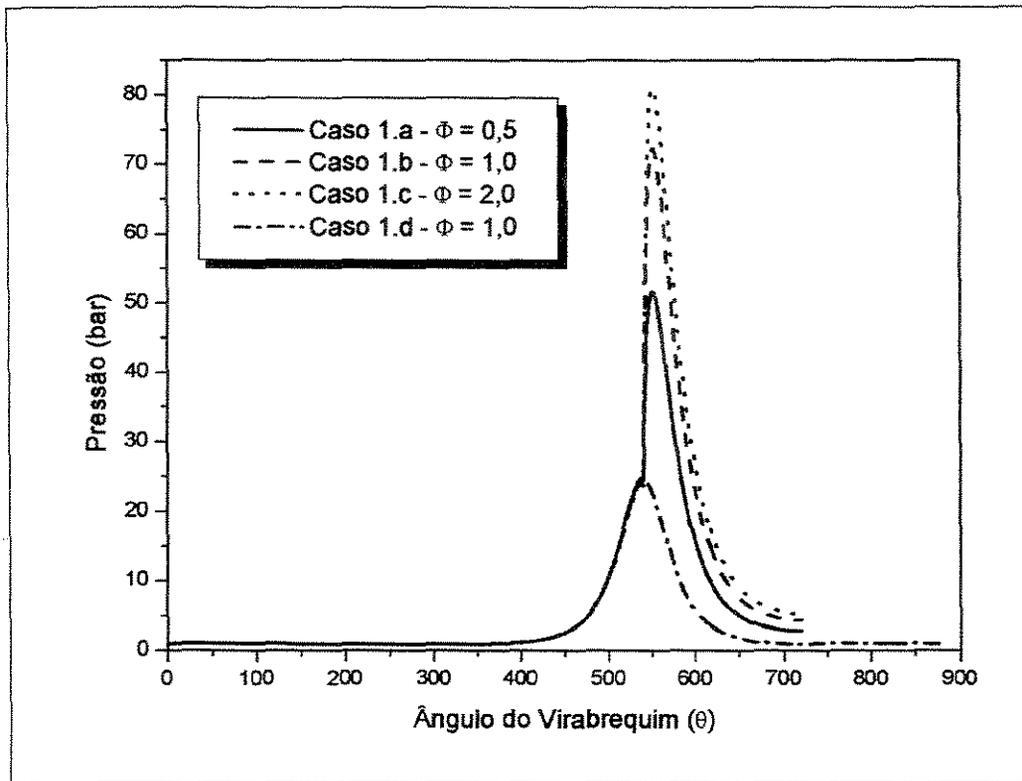


Figura 6.16: Pressão vs.  $\theta$  para o Caso 1.

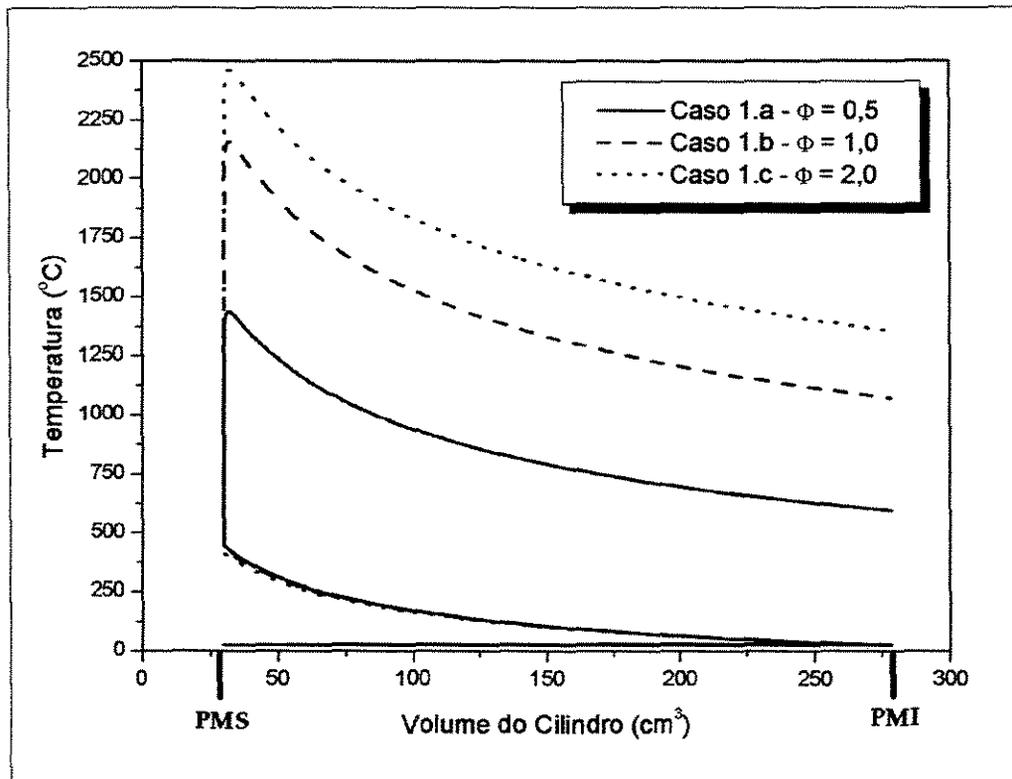


Figura 6.17: Diagrama T-V para o Caso 1.

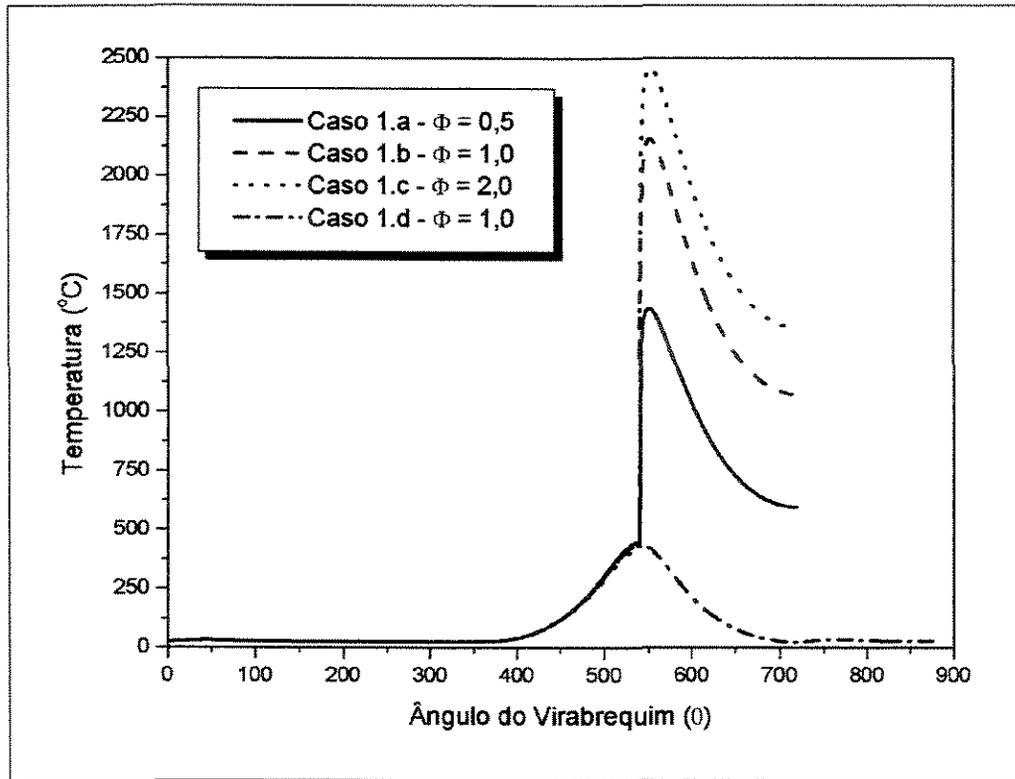


Figura 6.18: Temperatura vs.  $\theta$  para o Caso 1.

exibidos nas Figuras 6.17 e 6.18, é nítida a dependência da pressão com esta variável. A variação dos picos de temperatura entre os casos é um fator muito importante na avaliação destes resultados. Para o caso 1.d, o pico de temperatura médio na base do pistão alcançou um pouco mais de  $400^{\circ}\text{C}$ . Entretanto, no caso de combustão com menor concentração, caso 1.a, o pico de temperatura chegou a um valor próximo a  $1440^{\circ}\text{C}$ , temperatura esta que se acredita ser muito alta, seja pela alta concentração de combustível, mesmo sendo o menor  $\Phi$  de todos os casos, ou seja pela hipótese das paredes internas do cilindro serem modeladas como adiabáticas e não dissipando calor pelas suas fronteiras. O caso 1.c alcançou um pico de temperatura próximo a  $2500^{\circ}\text{C}$ , valor absurdamente alto. Em um cilindro convencional de motor pode ocorrer degradação térmica do material à esta temperatura. É evidente que isto na prática não ocorre, uma vez que a dosagem de combustível é realizada em base volumétrica e não estequiométrica. Assim, acredita-se que em um motor real jamais ocorreria uma super dosagem de combustível, a ponto de alcançar um  $\Phi$  superior a seu valor unitário.

Em se tratando dos escalares envolvidos na reação, primeiramente apresentam-se as concentrações dos reagentes envolvidos neste caso,  $\text{CH}_4$  e  $\text{O}_2$ , em função do ângulo do virabrequim. As Figuras 6.19 e 6.20 demonstram a evolução destas espécies químicas

ao longo dos estágios do motor.

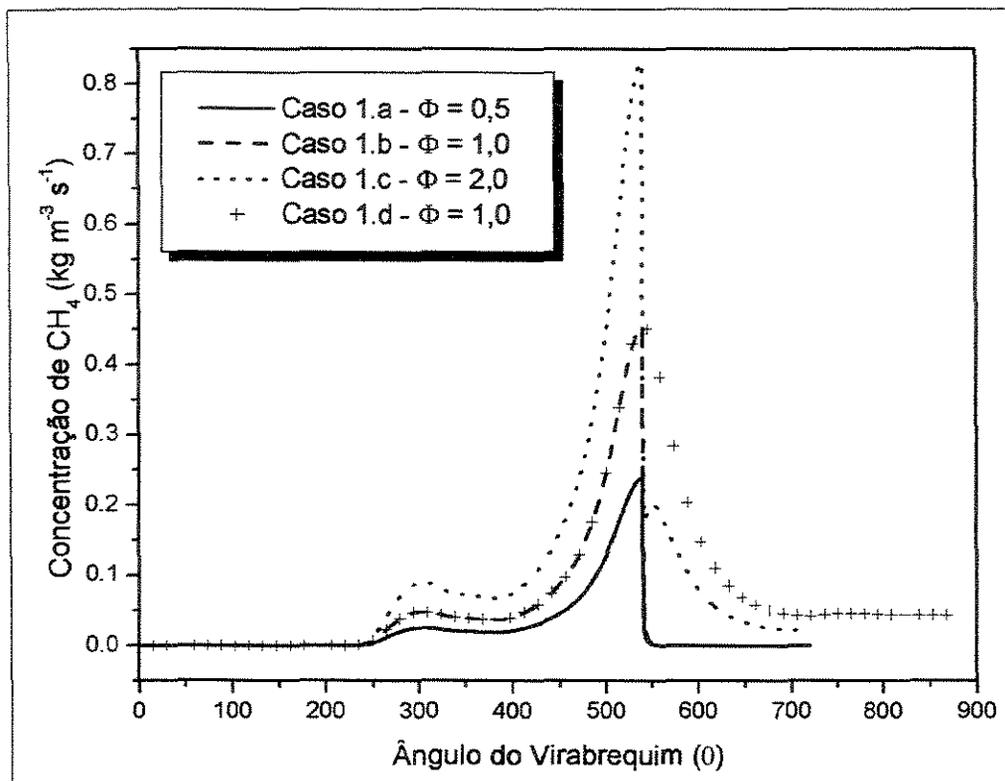


Figura 6.19: Concentração de  $CH_4$  para o Caso 1.

A concentração de cada espécie química é um adimensional. Entretanto, os resultados são apresentados na unidade  $kg.m^{-3}s^{-1}$ , resultante da fração mássica da espécie química,  $Y_i$ , multiplicada pela massa específica média da mistura, dando esta unidade. Nota-se, a partir das Figuras 6.19 e 6.20, a evolução da concentração do metano e oxigênio, respectivamente, e seus consumos nas etapas de ignição e expansão. Ambas curvas de  $CH_4$  e  $O_2$ , possuem aumento de concentração no estágio de máxima compressão no caso 1.d. Isto ocorre pelo fato da massa específica da mistura possuir um valor maior neste estágio. Percebe-se ainda que, mesmo com uma mistura estequiométrica,  $\Phi = 1$ , houve sobra de oxigênio após a combustão. Isto é decorrente das condições iniciais do problema, ou seja, o  $O_2$  é iniciado com 23% de composição no início da simulação. A Figura 6.21 apresenta a formação dos produtos,  $CO_2$  e  $H_2O$ , para este estudo de caso.

Pela Figura 6.21, evidencia-se que a concentração de produtos está diretamente ligada ao valor de  $\Phi$ . Há também, maior formação de dióxido de carbono em relação a água. Apresenta-se as concentrações dos produtos a partir de  $530^\circ$  de ângulo do virabrequim, uma vez que não há produtos antes da ignição da mistura.

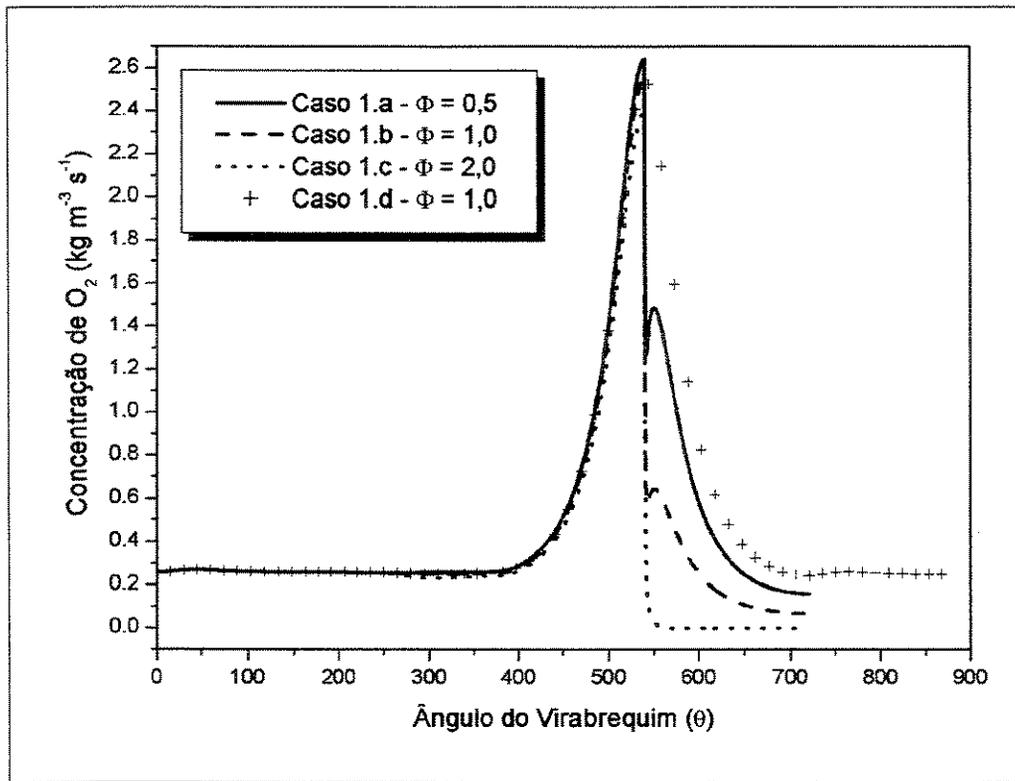


Figura 6.20: Concentração de  $O_2$  para o Caso 1.

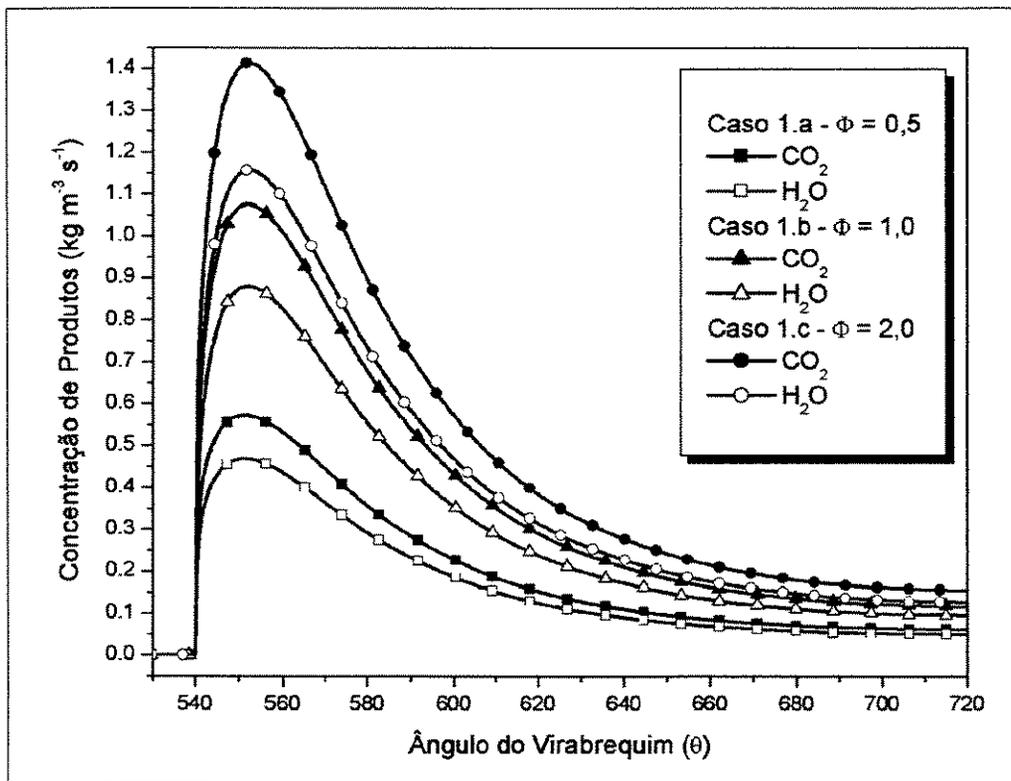


Figura 6.21: Concentração de produtos na etapa de expansão para o Caso 1.

### 6.2.3 Estudo de Caso 2

Este segundo estudo de caso avalia dois mecanismos de reação e uma espécie química extra, o monóxido de carbono, a ser utilizada nos cálculos, de acordo com as equações (5.7) e (5.8). WESTBROOK e DRYER (1981) acreditavam que uma etapa extra de mecanismo de reação fizesse com que a sobrepredição típica de um simples mecanismo fosse minimizada. Mais uma vez, apresentam-se os resultados deste estudo de caso com a utilização do modelo de dissipação Eddy, e com a modificação de constantes para ignição e formação da chama dentro da câmara de combustão.

As Figuras 6.22 e 6.23 apresentam a pressão média na base do pistão ao longo dos estágios do motor. Enquanto a Figura 6.22 traz a pressão em função do volume do cilindro, diagrama P-V, a Figura 6.23 traz a mesma variável em função do ângulo do virabrequim, diagrama convencional, respectivamente.

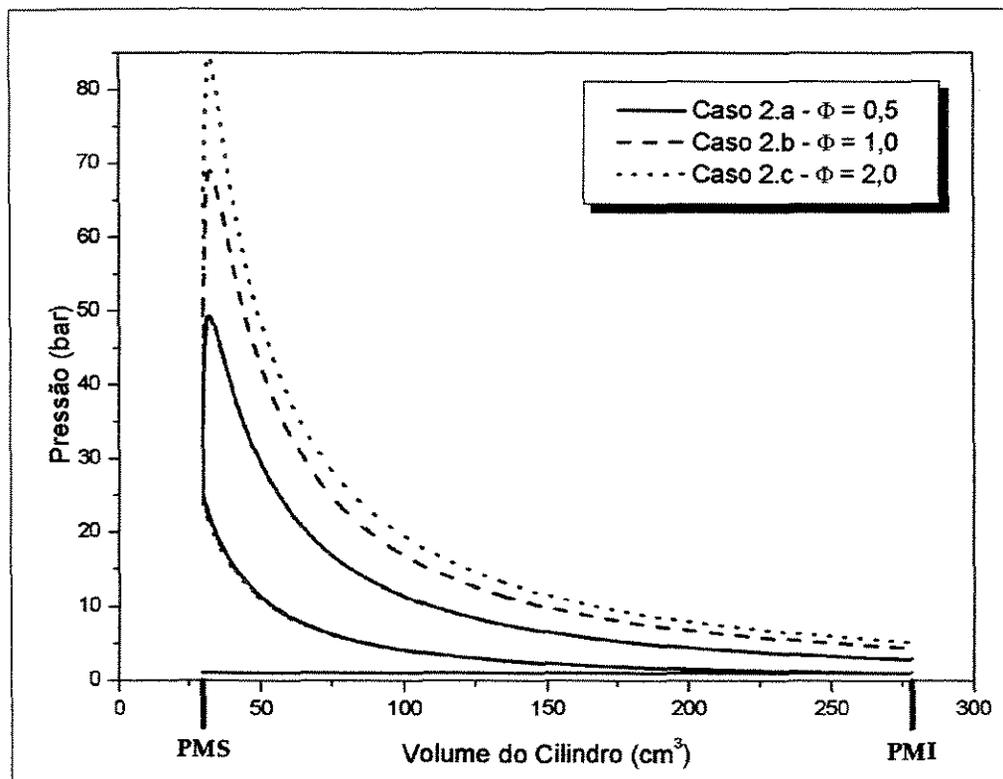


Figura 6.22: Diagrama P-V para o Caso 2.

Nota-se pouca diferença nos níveis de pressão deste estudo de caso quando comparados com o Caso 1. Esta fraca diferença pode ser visualizada em um diagrama P-V, no instante de ignição, a partir da Figura 6.24.

Para  $\Phi = 0,5$ , oxigênio em excesso, e  $\Phi = 1,0$ , o Caso 1, mecanismo de simples

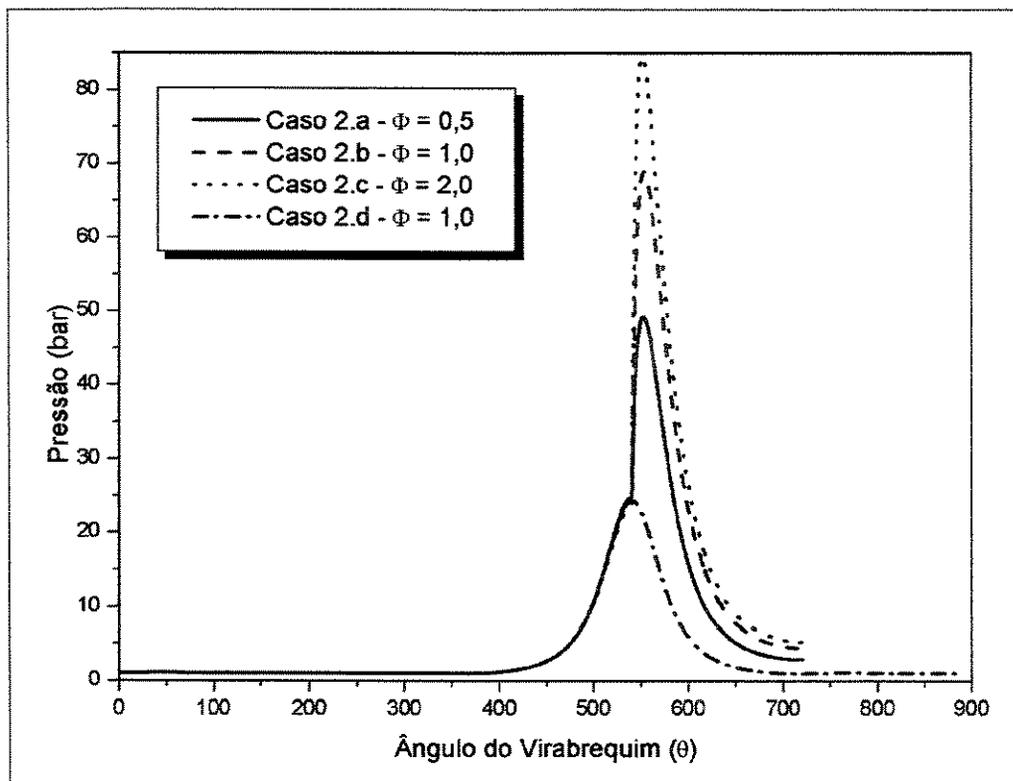


Figura 6.23: Pressão vs.  $\theta$  para o Caso 2.

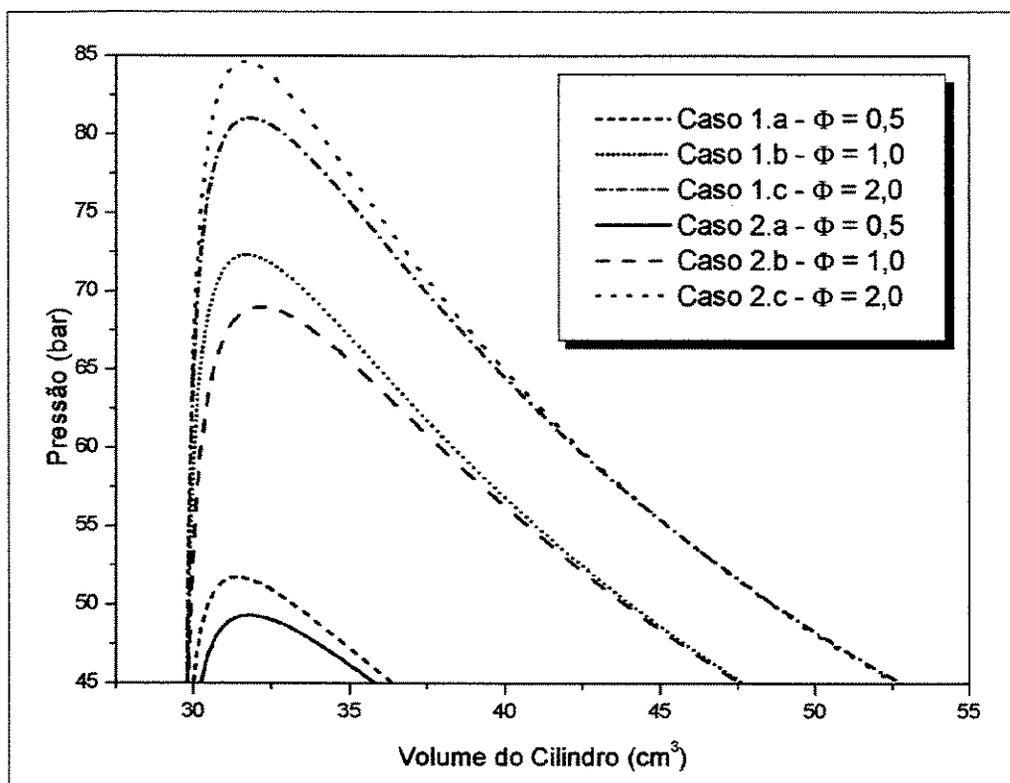


Figura 6.24: Comparação dos picos de pressão entre os Casos 1 e 2.

etapa de reação, obteve leve sobrepredição dos níveis de pressão, quando comparados com o Caso 2. Entretanto, para  $\Phi = 2,0$ , combustível em excesso, ocorreu efeito inverso, o Caso 2 foi quem obteve sobrepredição em relação ao Caso 1. Salienta-se que os picos de pressão para  $\Phi = 1,0$  e sem reação química obtiveram mesma magnitude, não demonstrados na Figura 6.24. A seguir, as Figuras 6.25 e 6.26 apresentam a temperatura média na base do pistão, ao longo da simulação.

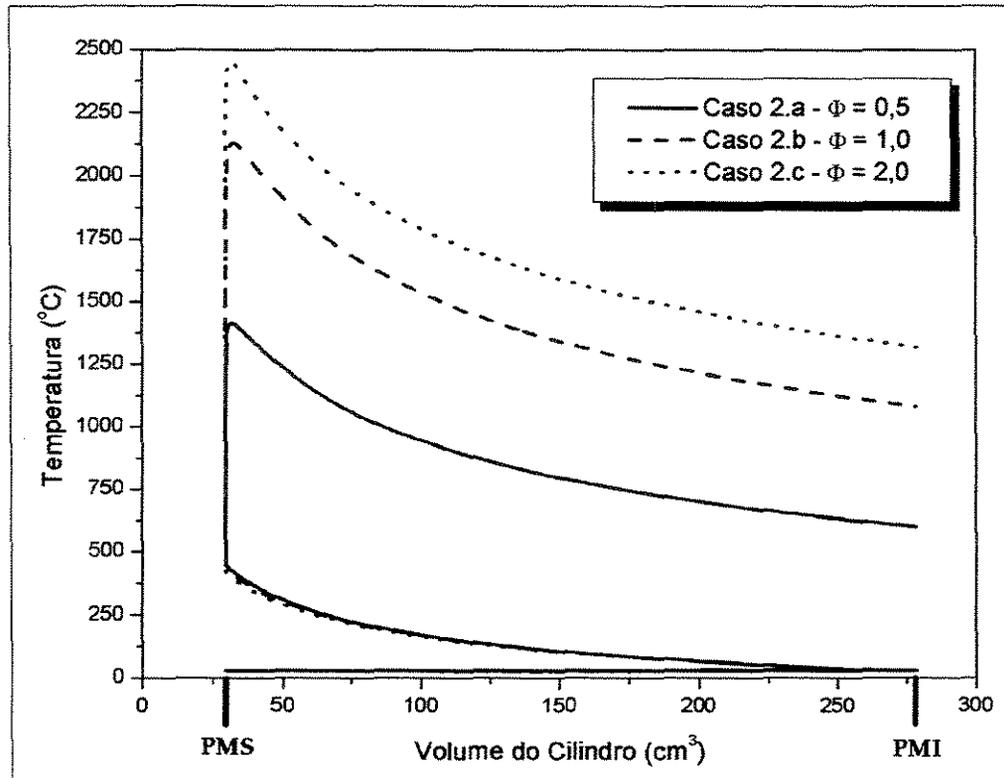


Figura 6.25: Diagrama T-V para o Caso 2.

Com relação à temperatura, os casos a partir do mecanismo de duas etapas obtiveram picos de temperatura semelhantes aos casos com o simples mecanismo de reação. Análogo à pressão, os mesmos fenômenos de picos de temperatura entre os Casos 1 e 2 foram visualizados, ou seja, sobrepredição do Caso 1, em relação ao Caso 2, para  $\Phi = 0,5$ , e  $1,0$ . Para  $\Phi = 2,0$ , o Caso 2 foi quem obteve leve sobrepredição. Estas diferenças acerca dos picos de temperatura são visualizadas, no instante de ignição, a partir da Figura 6.27.

As Figuras 6.28 e 6.29 trazem as concentrações de metano e oxigênio, respectivamente. As concentrações destes reagentes no estágio de admissão são exatamente às mesmas do Caso 1, conforme comparação entre as Tabelas 5.5 e 5.6.

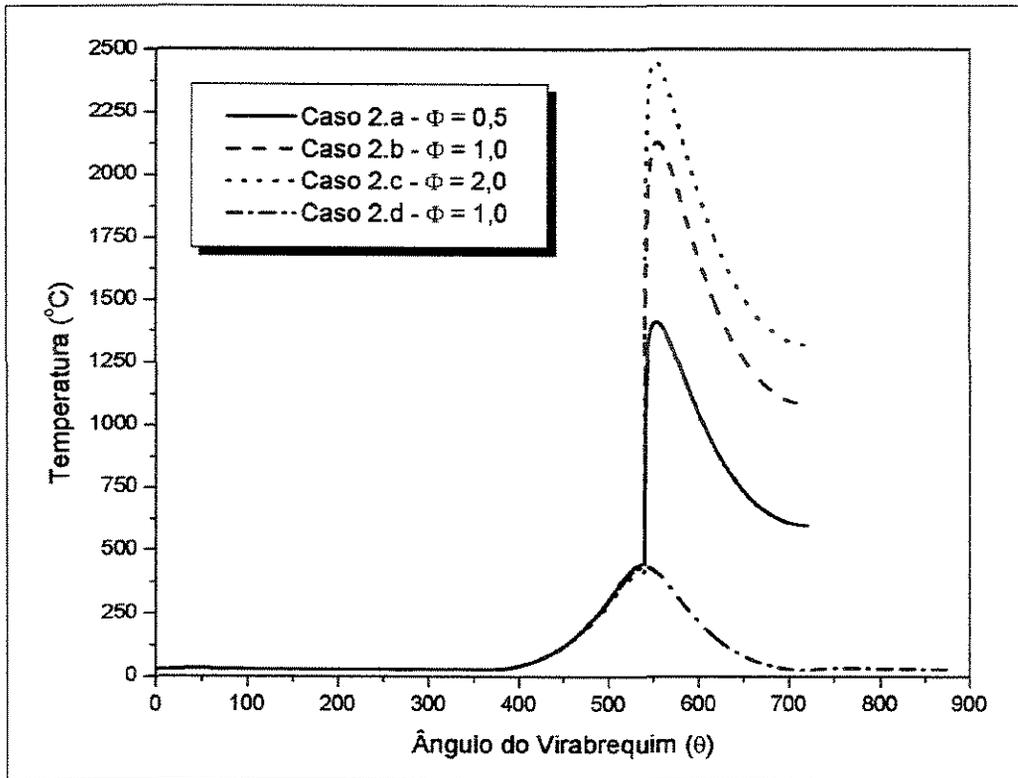


Figura 6.26: Temperatura vs.  $\theta$  para o Caso 2.

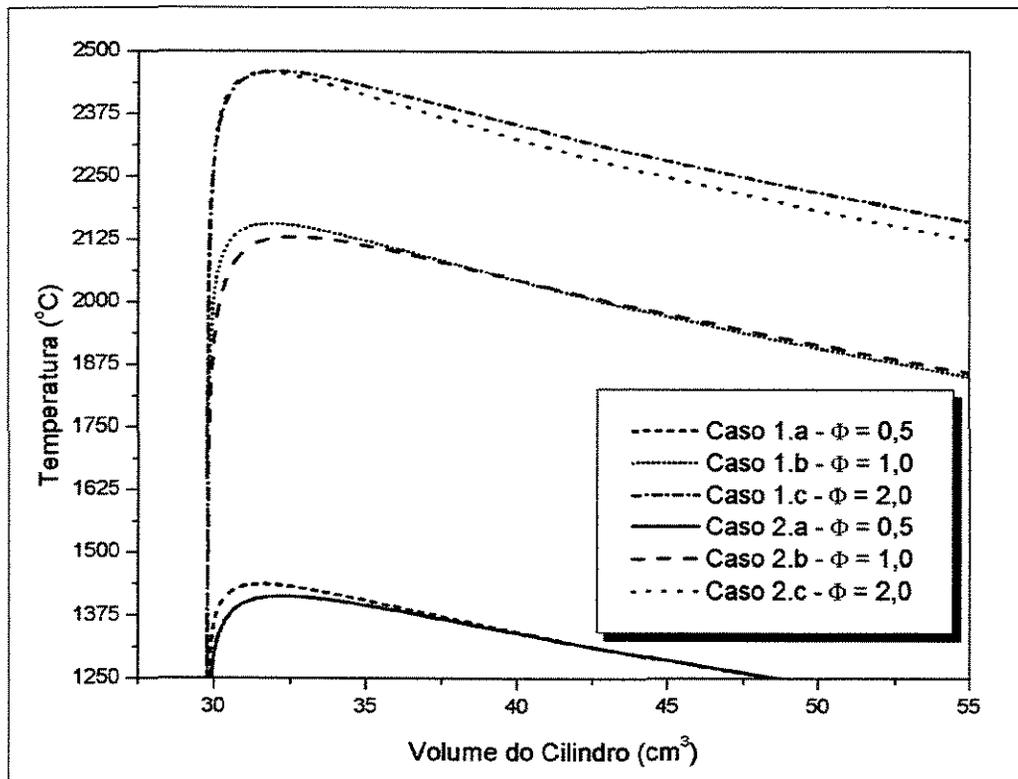


Figura 6.27: Comparação dos picos de temperatura entre os Casos 1 e 2.

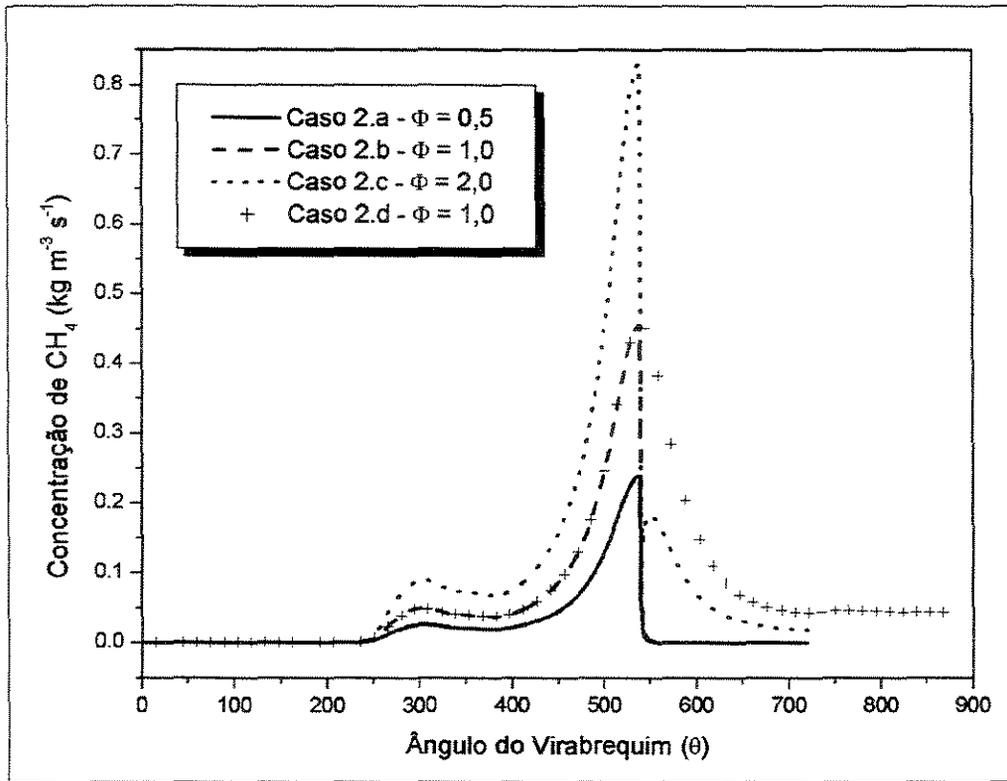


Figura 6.28: Concentração de  $CH_4$  para o Caso 2.

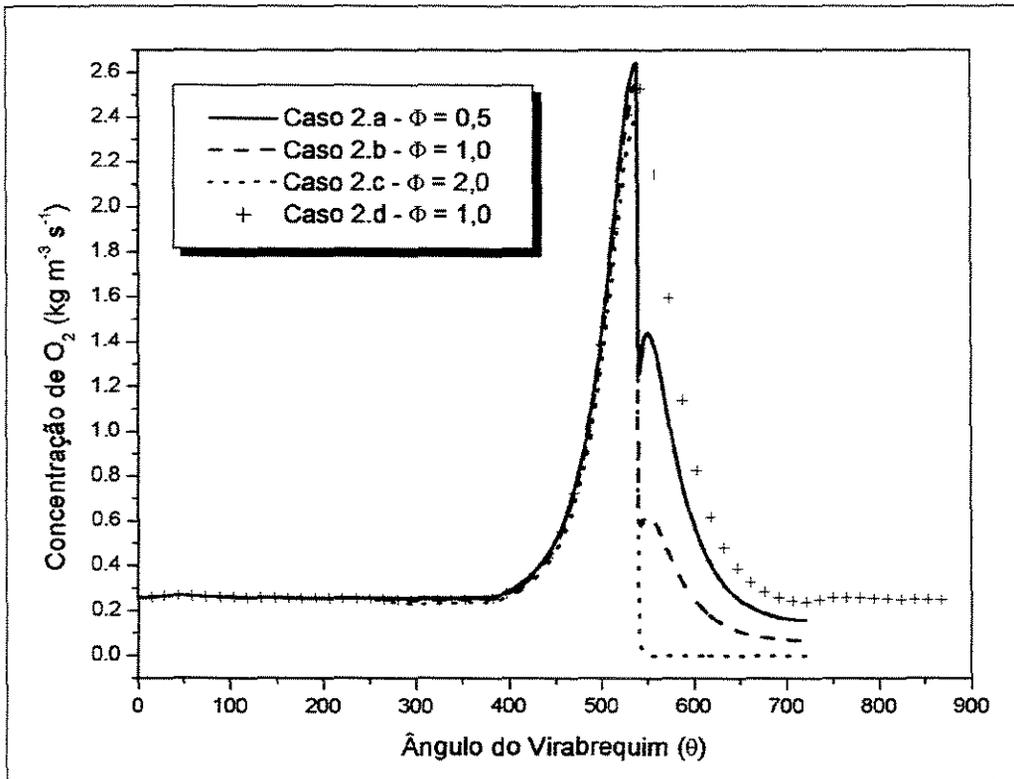


Figura 6.29: Concentração de  $O_2$  para o Caso 2.

Mais uma vez, nota-se o rápido consumo de metano logo após a ignição,  $\theta > 540^\circ$ , como mostra a Figura 6.28. Após o brusco consumo de combustível, que não é totalmente oxidado no caso 2.c, há uma leve elevação de sua concentração, decorrente do aumento da massa específica média da mistura, que por sua vez é função do acréscimo da temperatura.

Com relação ao oxigênio, Figura 6.29, há um leve aumento da concentração deste reagente, após consumo parcial, oriundo da reação, para  $\Phi = 0,5$ . É evidente que isto não ocorre quando  $\Phi = 2,0$ , uma vez que o metano está presente em excesso nesta mistura. Entretanto, na mistura estequiométrica,  $\Phi = 1,0$ , novamente ocorreu sobra de oxigênio no domínio ao final da reação, em virtude deste oxidante estar levemente em excesso nas condições iniciais do problema, isto é, 23% de  $O_2$  em todos os nós da malha, comparado com 22% deste reagente na entrada do duto de admissão.

Ressalta-se ainda que estes valores de concentração são médias aritméticas na base do pistão. Um procedimento de média volumétrica desta grandeza seria mais correto a aplicar nesta ocasião, entretanto, conforme comentado anteriormente, a sub-rotina utilizada para a dinâmica do conjunto pistão/válvulas não permitiu realização de tal procedimento de cálculo de média.

No caso da formação de produtos para este caso de duas etapas, há dois produtos finais, o dióxido de carbono e a água, além de uma espécie intermediária, o monóxido de carbono. As concentrações destes produtos, intermediários e finais, são apresentadas nas Figuras 6.30 e 6.31.

A concentração do intermediário, monóxido de carbono, está diretamente ligada à mistura ar/combustível presente no meio. Isto fica claro quando avalia-se a curva para  $\Phi = 2,0$ , a partir da Figura 6.30. Novamente, fica evidente, pela Figura 6.31, que a concentração dos produtos está diretamente ligada ao valor de  $\Phi$ . E conforme observado no Caso 1, ocorre maior formação de dióxido de carbono em relação a água. Comparado com o Caso 1, os valores de  $\Phi = 0,5$  e  $\Phi = 1,0$  praticamente obtiveram mesma concentração para ambos estudos de caso. Entretanto, para o caso 2.c, a concentração de  $H_2O$  quase alcançou o mesmo pico de concentração atingido pelo  $CO_2$ .

#### 6.2.4 Estudo de Caso 3

O último estudo de caso desta investigação científica apresenta os resultados simulados através do mecanismo de reação proposto por HAUTMAN *et al.* (1981) e comentado na seção 5.5.3 (pg. 65). Os autores propõem um mecanismo de quatro etapas de reação

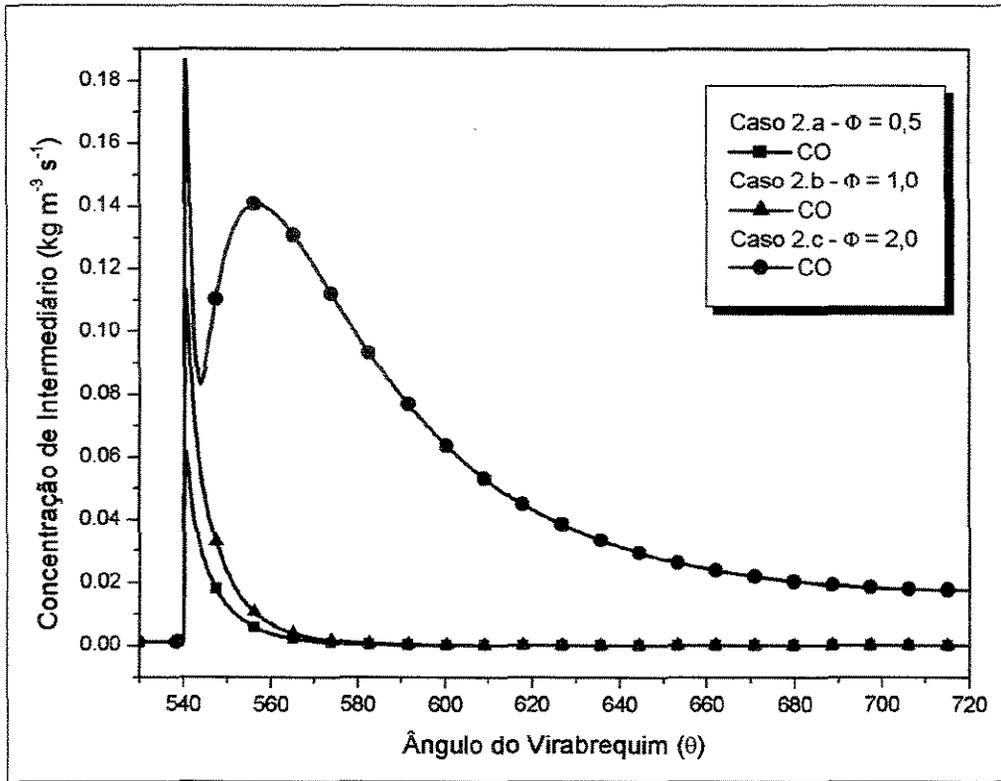


Figura 6.30: Concentração de intermediário,  $CO$ , para o Caso 2.

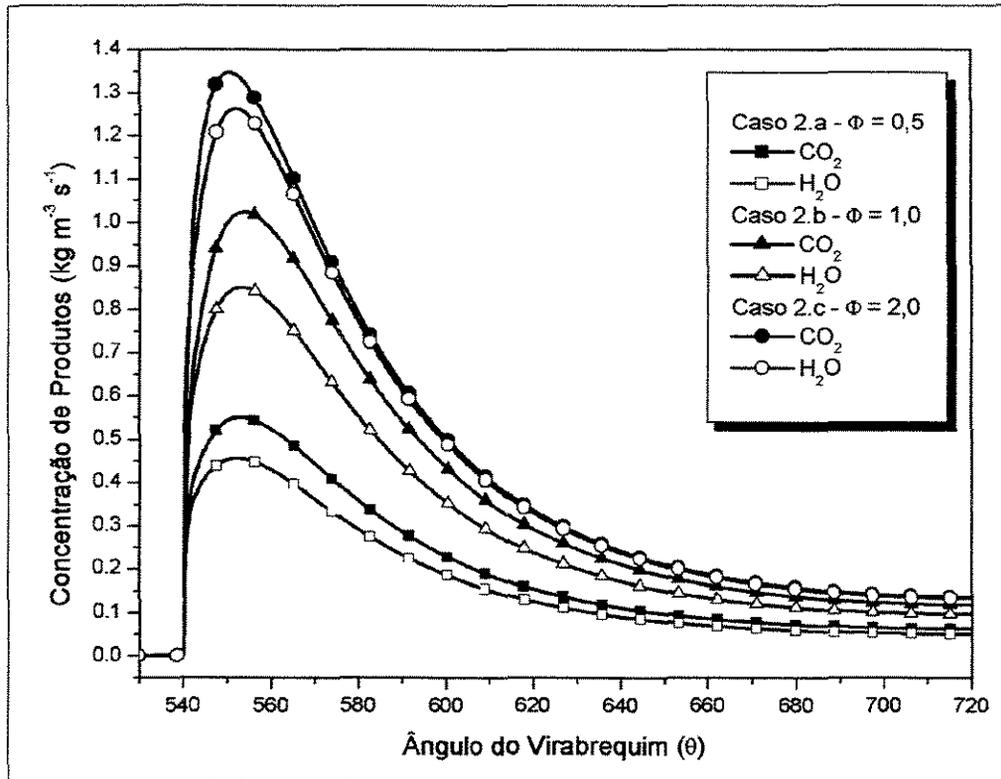


Figura 6.31: Concentração de produtos finais,  $CO_2$  e  $H_2O$ , para o Caso 2.

e o hidrocarboneto escolhido para a avaliação deste mecanismo foi o heptano( $C_7H_{16}$ ), justamente pelo fato desta espécie química estar implementada no banco de dados do pacote computacional.

As Figuras 6.32 e 6.33 apresentam a pressão média na base do pistão ao longo dos estágios do motor para este estudo de caso. Enquanto a Figura 6.32 exibe a pressão em função do volume do cilindro, diagrama P-V, a Figura 6.33 traz a mesma variável em função do ângulo do virabrequim, diagrama convencional, respectivamente.

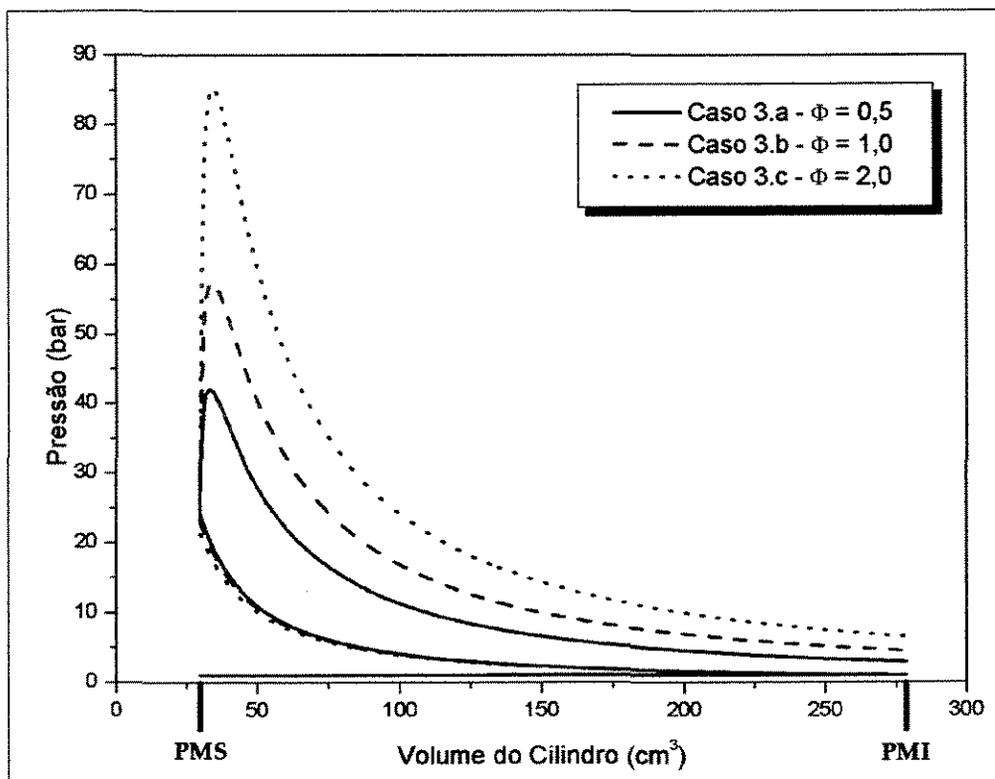


Figura 6.32: Diagrama P-V para o Caso 3.

Os picos de máxima pressão para os casos 3.a, 3.b e 3.c foram aproximadamente de 42bar, 57bar e 85bar, respectivamente. Com exceção ao caso 3.c, os picos de pressão dos demais casos foram menores que os picos provenientes da queima de metano, isto é, os casos 1.a e 2.a obtiveram um pico aproximado de 52bar e 49bar, enquanto os casos 1.b e 2.b apresentaram um pico aproximado de 72bar e 67bar, respectivamente.

É importante salientar que nenhuma condição de contorno foi alterada em função da mudança de combustível, e sim, somente os valores da concentração na região de admissão de fluido. Em relação aos picos de temperatura, estes podem ser facilmente visualizados a partir das Figuras 6.34 e 6.35.

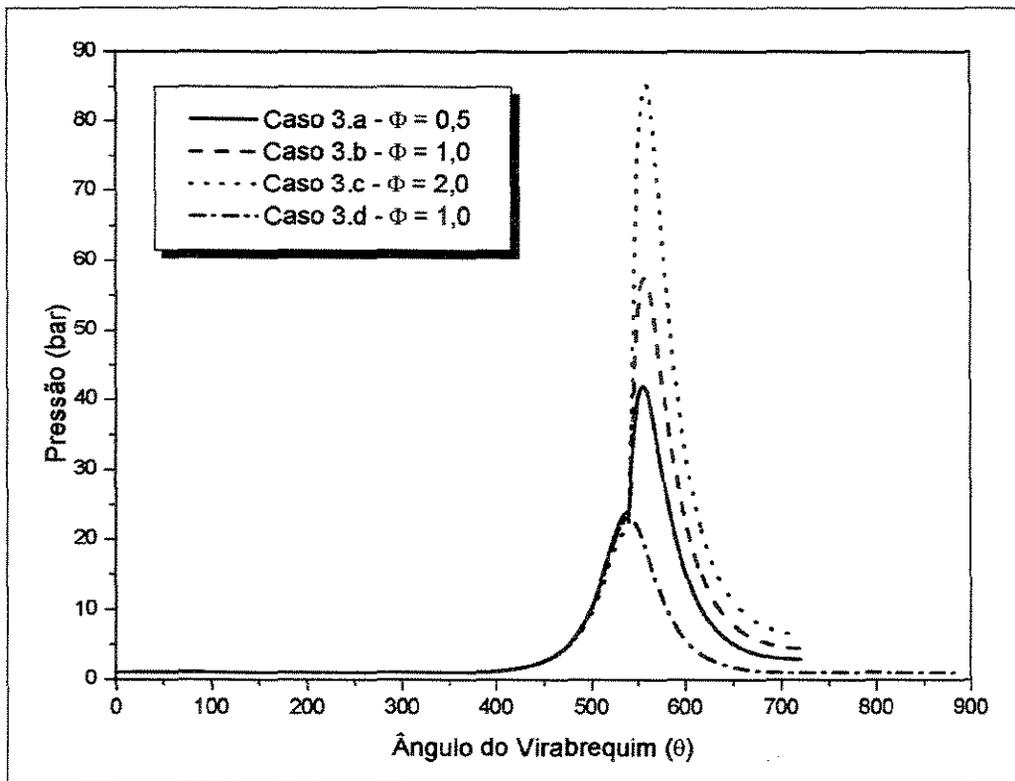


Figura 6.33: Pressão vs.  $\theta$  para o Caso 3.

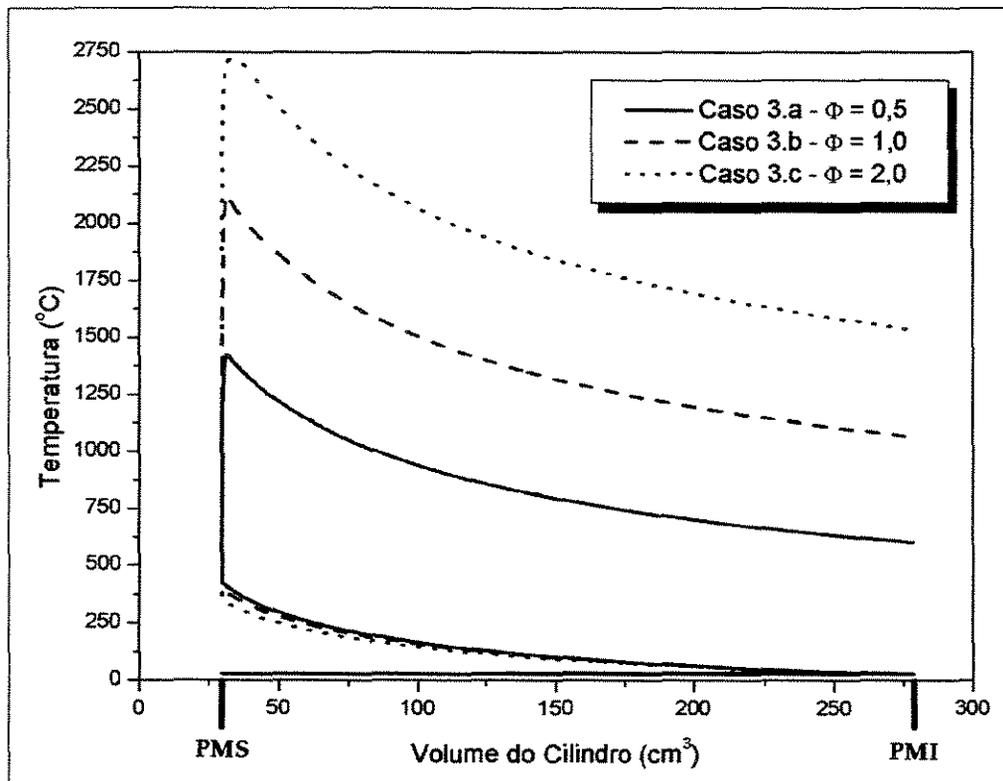


Figura 6.34: Diagrama T-V para o Caso 3.

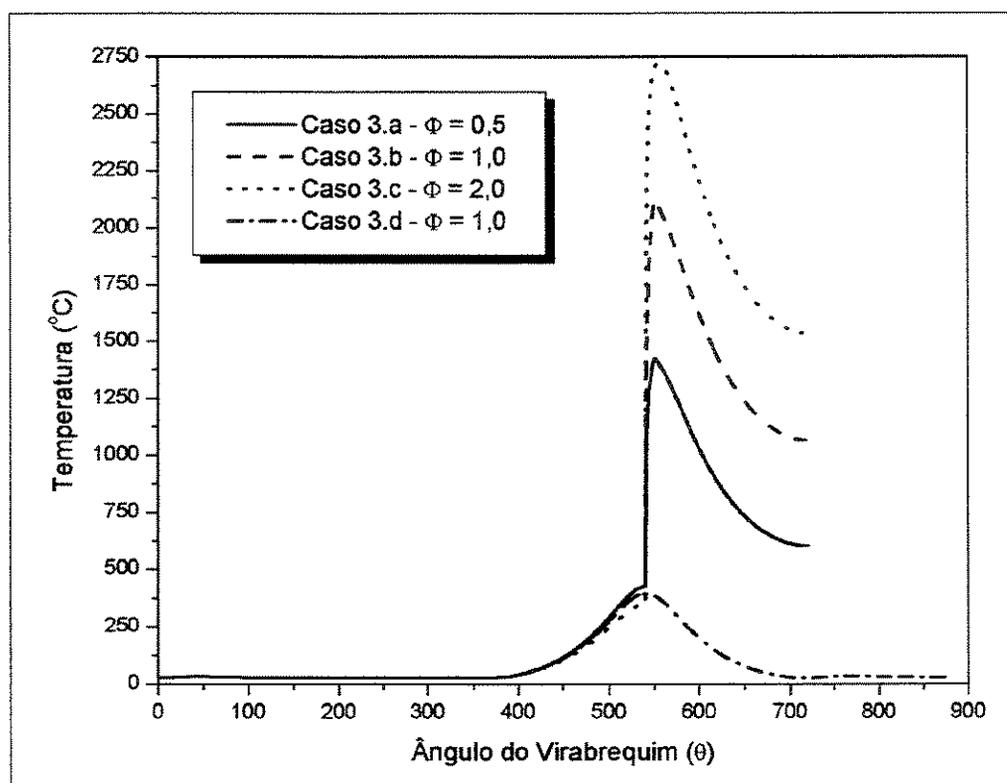


Figura 6.35: Temperatura vs.  $\theta$  para o Caso 3.

Os picos de máxima temperatura para o Caso 3 foram relativamente semelhantes aos Casos 1 e 2. Para  $\Phi = 0,5$  e  $\Phi = 1,0$ , o mecanismo de quatro etapas, e combustão de heptano, apresentou leve subpredição, entretanto, para  $\Phi = 2,0$ , este mecanismo apresentou sobrepredição do pico de máxima temperatura, comparado com os Casos 1 e 2. Resta saber se esta sobrepredição está relacionada às propriedades físicas do componente químico, heptano, ou se está relacionada ao esquema de mecanismo reacional.

Em se tratando de concentrações das espécies químicas, neste mecanismo existem oito componentes, sendo que dentre estes, dois são considerados reagentes, heptano e oxigênio; três são consideradas espécies químicas intermediárias, eteno, hidrogênio e monóxido de carbono; dois produtos, o dióxido de carbono e água; e por fim, o componente de restrição, o nitrogênio. As concentrações dos reagentes em função do ângulo do virabrequim são apresentadas nas Figuras 6.36 e 6.37.

Percebe-se, através da Figura 6.36, que todo heptano é reduzido à eteno e hidrogênio, com exceção ao caso 1.d, o qual não há ignição da mistura ar/combustível. Pela Figura 6.37, nota-se um brusco consumo e depois uma leve ascendência na concentração de  $O_2$ , para  $\Phi = 0,5$  e  $\Phi = 1,0$ , fenômeno observado para os dois estudos

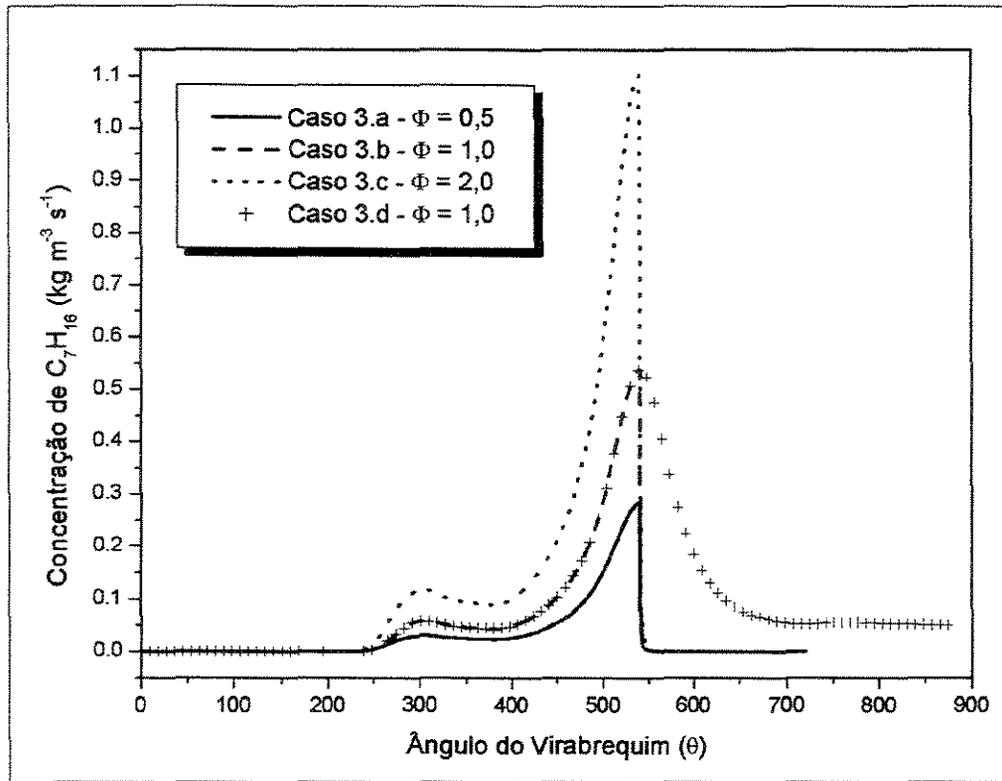


Figura 6.36: Concentração de  $C_7H_{16}$  para o Caso 3.

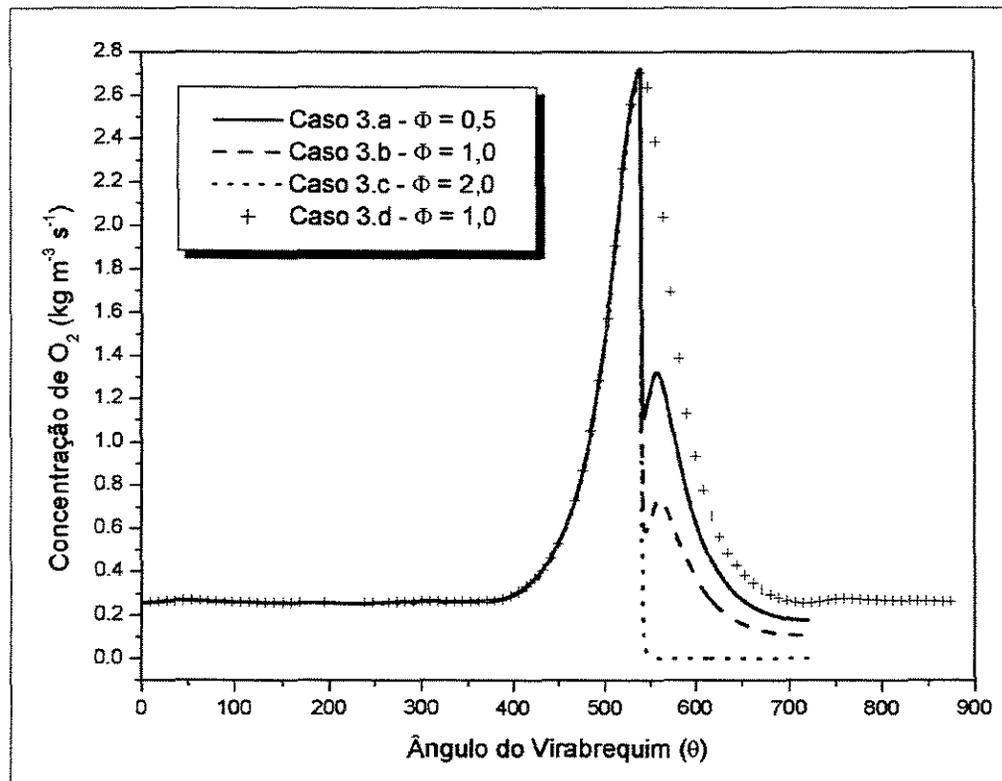


Figura 6.37: Concentração de  $O_2$  para o Caso 3.

de caso anteriores. Já para  $\Phi = 2,0$ , todo oxigênio é consumido na reação.

É interessante tomar conhecimento da concentração das espécies químicas intermediárias, mesmo que estas não sejam tão significativas nos resultados finais. Assim, as Figuras 6.38 e 6.39 apresentam a concentração dos produtos formados neste mecanismo de reação logo após a etapa de ignição.

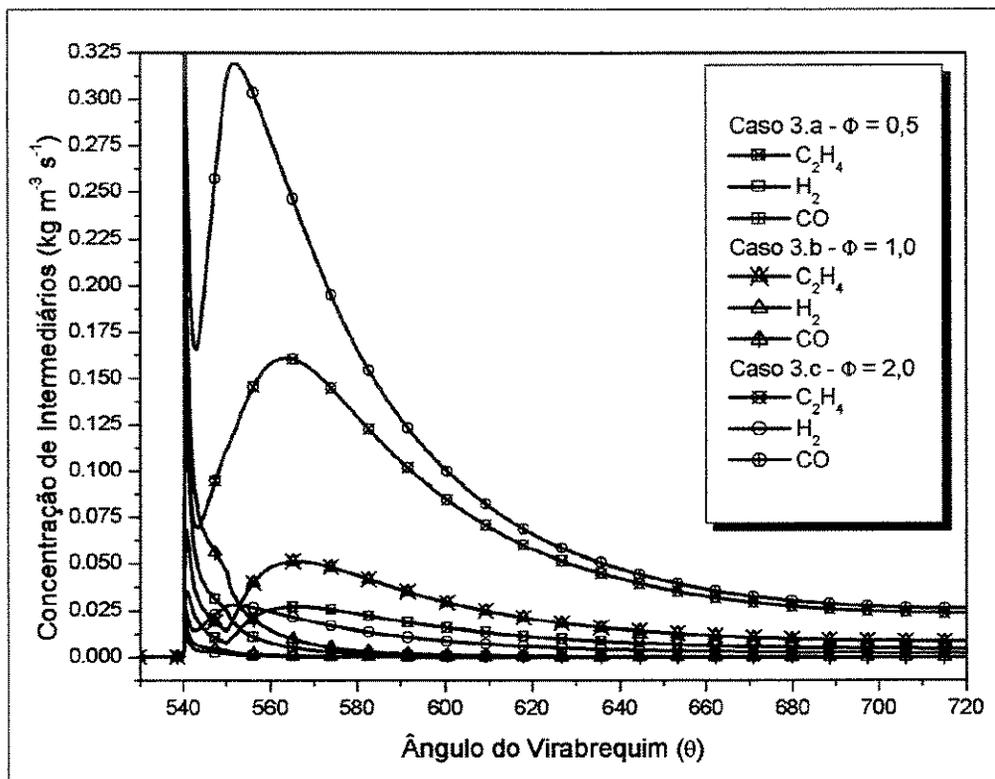


Figura 6.38: Concentração dos produtos intermediários para o Caso 3.

Nota-se, a partir da Figura 6.38, que há pouca quantidade de intermediários formados, ou melhor, todos os intermediários formados são imediatamente convertidos a produto. Somente para  $\Phi = 2,0$ , que é mais nítida a formação e subsequente consumo de intermediários, em que a espécie química de maior concentração é o monóxido de carbono, seguida do eteno. Já a Figura 6.39 demonstra os produtos globais da reação,  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ , formados nas duas últimas etapas de reação, conforme apresentadas nas equações (5.11) e (5.12). E, mais uma vez, percebe-se que a formação de dióxido de carbono é superior à formação da água.

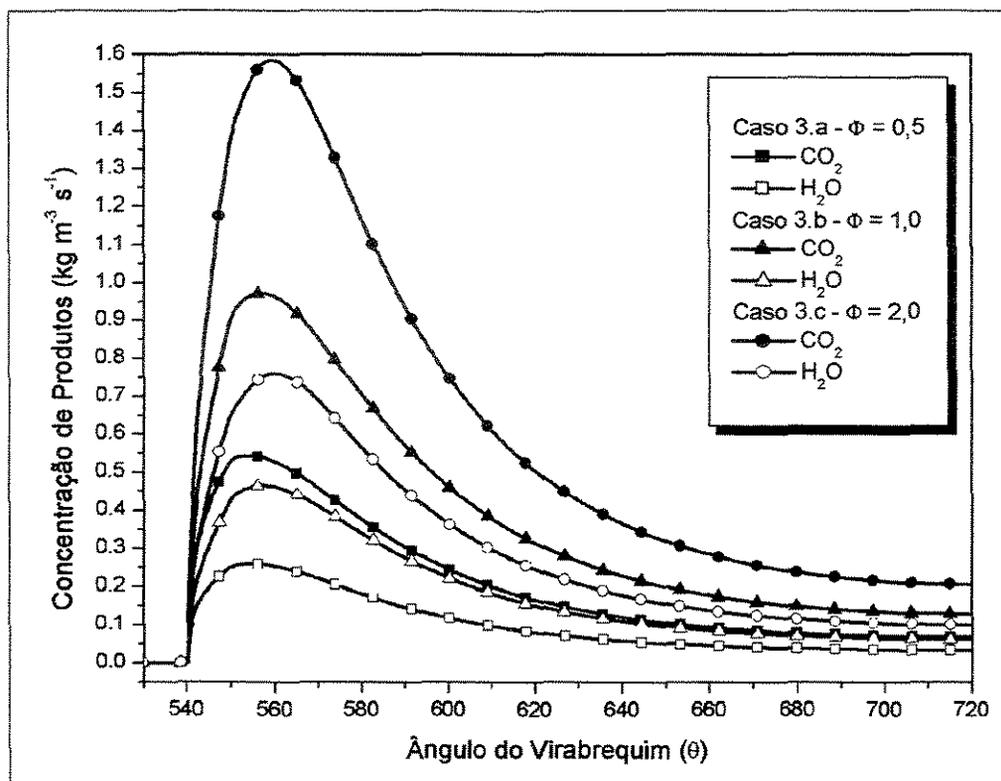


Figura 6.39: Concentração dos produtos finais para o Caso 3.

## 6.2.5 Comparação entre os Estudos de Caso

Encerrando este capítulo, apresentam-se tabelas comparativas entre os três estudos de caso avaliados nesta dissertação, destacando os picos de pressão e temperatura para as diversas misturas ar/combustível propostas anteriormente. Primeiramente, a Tabela 6.1 traz a comparação destas propriedades para os casos sem reação química.

Caso	1.d	2.d	3.d
P(bar)	24	24	23
T( $^{\circ}\text{C}$ )	433	433	398

Tabela 6.1: Comparação dos picos de pressão e temperatura para os estudos de caso sem reação química.

A partir da Tabela 6.1, pouca variação da pressão nos três estudos de caso avaliados é observada, ou seja, o heptano foi quem obteve leve diferença do pico de pressão, apenas de 1bar. Já com relação aos picos de temperatura, houve variação significativa entre o metano e heptano. Nota-se também que o pico de temperatura

para um caso sem combustão independe de seu mecanismo de reação. A comparação destas mesmas propriedades para os casos com reação química são apresentadas na Tabela 6.2.

Caso	1.a	2.a	3.a	1.b	2.b	3.b	1.c	2.c	3.c
P(bar)	52	49	42	72	67	57	81	84	85
T(°C)	1438	1413	1426	2155	2130	2123	2460	2458	2726

Tabela 6.2: Comparação dos picos de pressão e temperatura para os estudos de caso com reação química.

Diferenças acerca dos combustíveis e mecanismos de reação são nítidas a partir da Tabela 6.2. Como comentado anteriormente, nota-se sobrepredição dos picos de pressão e temperatura, na combustão de metano, do mecanismo de simples etapa em relação ao de dupla etapa, ou seja, em que  $\Phi = 0,5$  e  $\Phi = 1,0$ . Para  $\Phi = 2,0$ , combustível em excesso, inverte-se esta observação. É nesta concentração que o mecanismo de dupla etapa é o que apresenta sobrepredição. Percebe-se ainda a magnitude dos picos de pressão e temperatura em função das concentrações.

O heptano apresentou um fenômeno análogo ao visualizado com o metano. Para os dois casos de menor concentração de combustível, a combustão de heptano alcançou níveis menores de pico de pressão, enquanto que para combustível em excesso,  $\Phi = 2,0$ , o heptano apresentou leve sobrepredição, quando comparado ao metano. Com relação a temperatura, este hidrocarboneto apresentou maiores picos de temperatura em todas as concentrações estudadas. Isto pode ser decorrente das propriedades físicas do combustível, bem como as três etapas exotérmicas presentes em seu mecanismo de reação.

# Capítulo 7

## Conclusões e Recomendações

Até poucos anos atrás, era muito comum que os pesquisadores na área de CFD desenvolvessem códigos próprios que personalizassem seus respectivos objetos de estudo. O aspecto positivo era que o programador tinha total domínio de sua ferramenta tecnológica e podia implementar uma gama de modelos e algoritmos conforme suas necessidades e anseios. Entretanto, o outro lado da moeda era escancarado pela dificuldade de implementação e os vários problemas encontrados durante este desenvolvimento, tais como erros de compilação e implementação, semanas de programação, necessidade constante de realizar cópias reserva de seu código, entre outros.

Pouco a pouco, os códigos comerciais de CFD foram ganhando espaço e conquistando o mercado. Por um lado oferecem a versatilidade de se trabalhar com quaisquer objetos de estudo, dependendo da área de interesse do pesquisador, aliada com uma gama imensa de modelos e algoritmos necessários para abordar seu respectivo problema. Porém, o investimento financeiro na compra e manutenção de um código comercial e o tempo necessário para seu aprendizado e treinamento são muito custosos, sem contar que muitos pacotes comerciais são verdadeiras “caixas pretas”, em que o usuário limita-se a inserir seus modelos e algoritmos somente em partes personalizáveis do pacote computacional.

O motor de um carro, ao mesmo tempo visto como um equipamento característico da engenharia mecânica, nada mais é que um complexo reator químico e contínuo, visualizado dentro da engenharia química. Para a realização deste trabalho, houve a necessidade de buscar informações em ambas engenharias.

Assim, pode-se dizer que as principais conclusões deste trabalho de investigação científica resumem-se às dificuldades da abordagem deste complexo equipamento au-

tomotivo, e à tentativa da boa representação de todas as suas características fenomenológicas utilizando um robusto e versátil simulador comercial de CFD, o CFX-TASCflow<sup>TM</sup>.

A idéia inicial deste trabalho consistiu em simular e propor uma mistura ótima de ar/combustível, visando maximização da potência do motor através de um motor específico, neste caso, o motor de um FIAT Palio 1.0, com duas válvulas por cilindro. Em nenhum momento almejou-se otimização de características operacionais e geométricas, fato este que levou a optar-se por um simples grid bidimensional e um simples arranjo das válvulas e do cilindro. Montou-se o cilindro com as válvulas paralelas à base do pistão, vide Figura 5.6, o que na realidade não ocorre, pois as válvulas têm uma inclinação de aproximadamente 45 graus em relação à base do pistão. Entretanto, mesmo com esta característica geométrica simplificada, captaram-se todos os efeitos desejados no que se refere ao escoamento fluido no interior de um cilindro de um motor à combustão interna, além de realizar todos estes estudos em um tempo hábil, em virtude do grid ser bidimensional.

Uma vez que todas as condições operacionais do motor foram ajustadas para o grid numérico proposto nesta investigação científica, algumas características fenomenológicas interessantes puderam ser reproduzidas. Verificaram-se nas simulações, a existência de vários vórtices, que nada mais são do que zonas de recirculação, nos estágios em que há abertura das válvulas, e são exatamente nestes estágios que ocorrem os maiores campos de velocidade. O ângulo de cruzamento é um pseudo-estágio importantíssimo, pois, dependendo da regulagem do motor, perde-se muito combustível não queimado, ou ainda, uma parcela dos gases de combustão exauridos no ciclo anterior são reinjetados no cilindro, dificultando a ignição posterior da mistura. Já os estágios de compressão e expansão, em que ambas válvulas estão seladas, ocorrem os maiores gradientes de pressão no interior do cilindro, em virtude do deslocamento do pistão.

No que se refere à combustão dentro desta câmara, os mecanismos de reação abordados e extraídos dos trabalhos de WESTBROOK e DRYER (1981) e HAUTMAN *et al.* (1981) mostraram-se versáteis, permitindo análises de quaisquer hidrocarbonetos. Entretanto, limitou-se à utilização de espécies químicas implementadas no CFX-TASCflow<sup>TM</sup>, metano e heptano. Acredita-se que, enquanto o metano pode reproduzir fielmente o gás natural (GNV), pois é encontrado em maior quantidade neste combustível, o heptano pode reproduzir em parte o comportamento de uma gasolina. Os resultados mostraram que misturas em bases estequiométricas de ambos combustíveis apresentaram basicamente os mesmos níveis de temperatura e pressão, e

que pouca diferença ocorreu entre os mecanismos de simples e duas etapas de combustão de metano.

Há alguns anos o modelo EDM vem sendo utilizado para escoamentos reacionais em quaisquer geometrias. Nos escoamentos com predominância convectiva, é comum a taxa de reação ser representada por um modelo de mistura física, em que os parâmetros turbulentos controlam a reação. Para escoamentos com maior predominância difusiva, é comum a opção por um modelo cinético de taxa de reação. Este trabalho testou ambos modelos. Primeiramente, testou-se o modelo cinético para os três estudos de caso, porém dificuldades foram encontradas na etapa de ignição, ou seja, ou a mistura não reagia, ou esta reagia violentamente, a ponto de resultados não-físicos serem encontrados, tais como frações mássicas maiores que o valor unitário, temperaturas absurdas, além de problemas de convergência. Acredita-se que tais parâmetros cinéticos levantados, aplicados neste estudo, caíram fora da faixa limite de sua aplicabilidade.

O modelo de mistura física, com o artifício de alteração de constantes, provou ser útil e apresentou resultados coerentes no que se refere às variáveis de interesse. Entretanto, ressalta-se um aspecto negativo deste modelo de taxa de reação. Uma vez promovida a ignição da mistura dentro do domínio computacional, esta desencadeava uma formação descontrolada da chama, fazendo com que em toda região onde houvesse certa concentração de combustível e oxidante, ocorresse reação. Significa dizer que em todos os estudos de caso realizados nesta dissertação, combustão indevida no duto de admissão de fluido foi promovida, fato este que não ocorre na realidade, mas que não influencia de maneira alguma os resultados da simulação; uma vez que o duto de entrada de fluido não está em contato com o cilindro, a válvula de admissão está selada, e as paredes do domínio são consideradas adiabáticas.

A busca por um meio de corroboração dos resultados apresentados neste trabalho é um fator agravante na validação e verificação de toda modelagem empregada. Assim, todos os resultados, sejam qualitativos ou quantitativos, demonstrados nesta dissertação, têm caráter meramente ilustrativo e não devem ser interpretados como a absoluta verdade, e sim, espera-se que tais resultados forneçam subsídios na exploração e investigação mais profunda desta linha de pesquisa, de motores à combustão interna.

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

- Como primeira sugestão, cita-se a necessidade da validação experimental de toda esta simulação. Dados de bancada são essenciais para a validação e verificação

de toda modelagem empregada. Variáveis como pressão e temperatura são as mais importantes em um estudo desta natureza, pois estão ligadas diretamente à energia e a potência geradas e consumidas pelo motor. Uma vez obtidos tais dados, as hipóteses empregadas nesta modelagem, como grid bidimensional, lei dos gases ideais, paredes adiabáticas, entre outros, serão perfeitamente passíveis de avaliação, e assim, se partiria para a alteração de hipóteses na tentativa de representação dos dados experimentais.

- Esta é uma sugestão que se ramifica da anterior, mas que é importante salientar. É necessário um maior estudo paramétrico de simulação a respeito de variáveis e hipóteses utilizadas neste trabalho, tais como condições de contorno, as quais não são constantes e são muito importantes, além de parâmetros de solução de escoamento, tais como esquemas de interpolação e número de iterações por passo de tempo, por exemplo. Acredita-se que o número de iterações por instante de tempo utilizado neste trabalho, de apenas 2 em cada ciclo transiente, seja muito pouco para resolver toda não-linearidade dos termos presentes nas equações discretizadas. Optou-se por este número em função que 1 iteração seria insuficiente e mais que 2, problemas de convergência começaram a aparecer no decorrer da solução do problema.
- Propõe-se também a solução deste motor em uma geometria tridimensional, em que o arranjo do cilindro, pistão e válvulas sejam criados com a maior semelhança possível do motor real. É evidente que esta etapa não é trivial e despenderá um absurdo tempo de implementação dos mesmos procedimentos realizados com a abordagem bidimensional. Uma vez ajustada toda a dinâmica da malha tridimensional, será gasto tanto tempo na solução do problema, quanto na própria adequação de sua dinâmica, pois os grids passarão a conter um número muito maior de elementos. Em termos de comparação, o grid B deste trabalho possui pouco mais de 10.000 células. Acredita-se que um grid tridimensional razoável, não tão refinado, poderá conter, no mínimo, mais de 500.000 elementos, ou seja, gastar-se-á até mais de cinquenta vezes, pois a relação não é linear, o tempo gasto para resolver uma malha bidimensional.
- Certamente a implantação de uma modelagem cinética para a taxa de reação engrandeceria sobremaneira o trabalho. Entretanto, sabe-se que é muito difícil levantar parâmetros cinéticos, válidos para várias faixas de operação, e mecanismos que contenham poucas etapas de reação. É mais comum encontrar trabalhos na literatura em que pesquisadores estudam uma certa reação, de um hidrocarbo-

neto por exemplo, e apresentam suas mais de duzentas etapas intermediárias de reação. Isto ainda está fora de cogitação em estudos de CFD. Certamente existem outros modelos de combustão utilizados que também representam a dinâmica de formação da chama, citam-se dois modelos, o “*Weller 2-Equation Model*” e o “*G-Equation Model*”, ambos implementados no STAR-CD.

- Para o caso da impossibilidade de levantamento de parâmetros cinéticos, sugere-se adequar a expressão de taxa de reação do modelo EDM, como uma função da posição. Assim, problemas como reações em locais indevidos, seriam inibidos por esta dependência espacial. Acredita-se que esta seja uma etapa não muito complexa, mas que certamente demandará um certo tempo, pois, o fator limitante neste caso é a capacidade do código computacional ser passível de modificação ou não. Ou ainda, promover um outro mecanismo de perturbação desta taxa de reação, diferente da perturbação realizada neste trabalho, para que a combustão ocorra somente no interior do cilindro, conforme sugerido por HJERTAGER (2003).

E para finalizar, acredita-se que este trabalho, a despeito de sua contribuição científica, tenha, sobretudo, contribuído profundamente na aquisição de experiência científica em nível de mestrado. Experiência esta traduzida em espírito crítico e metodologia científica, necessárias à criação e à condução de uma linha de pesquisa em fluidodinâmica computacional para o tratamento dos mais diversos problemas ligados diretamente aos fenômenos da Engenharia Química.

# Referências Bibliográficas

- ABU-ORF, G. M. and CANT, R. S. A Turbulent Reaction Rate Model for Premixed Turbulent Combustion in Spark-Ignition Engines. *Combustion and Flame*, Elsevier Science Limited, 122:233-252, 2000
- ALVES, J. J. N. Modelagem Fenomenológica e Simulação Bidimensional da Fluidodinâmica de Reatores de Leito Fluidizado Circulante. Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1998
- BRINK, A.; MUELLER, C.; KILPINEN P. and HUPA, M. Possibilities and Limitations of the Eddy Break Up Model. *Combustion and Flame*, Elsevier Science Limited, 123:275-279, 2000
- BAILLY, O.; BUCHOU C.; FLOCH, A. and SAINSAULIEU, L. Simulation of the Intake and Compression Strokes of a Motored 4-Valve SI Engine with a Finite Element Code. *Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP*, Vol. 54, No. 2, 161-168, 1999
- CEBECI, T. and SMITH, A. M. O. Analysis of Turbulent Boundary Layers. *Academic Press - New York*, New York, U.S.A., 1974.
- CFX-TASCFLOW VERSION 2.11.01. CFX-TASCflow User guide. AEA Technology Engineering Software Limited. Waterloo, Ontario, Canada, 2001
- CHAN, V. S. S. and TURNER, J. T. Velocity Measurement Inside a Motored Internal Combustion Engine Using Three-Component Laser Doppler Anemometry. *Optics & Laser Technology*, 32, 557-566, 2000
- CLARKE, D. S. and WILKES, N. S. The Calculation of Turbulent Flows in Complex Geometries Using A Differential Stress Model. *Report AERE-R 13428, Engineering Sciences Division*, Harwell Laboratory, 1989
- DESCHAMPS, B and BARITAUD, T. Visualization of Gasoline and Exhaust Gases

- Distribution in a 4-Valve SI Engine: Effects of Stratification on Combustion and Pollutants. *Revue de L'Institut Français Du Pétrole*, Vol. 52, No. 6, 651-667, 1997
- FAN, L. and REITZ, R. D. Spray and Combustion Modeling in Gasoline Direct-Injection Engines. *Atomization and Sprays*, 10:219-249, 2000.
  - GOSMAN, A. D. State of the Art of Multi-Dimensional Modeling of Engine Reacting Flows. *Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP*, Vol. 54, No. 2, 149-159, 1999
  - HAUTMAN, D. J.; DRYER, F. L.; SCHUG, K. P. and GLASSMAN, I. A Multiple-step Overall Kinetic Mechanism for the Oxidation of Hydrocarbons. *Combustion Science and Technology*, 25:219-235, 1981
  - HAWORTH, D. C. and JANSEN, K. Large-Eddy Simulation on Unstructured Deforming Meshes: Towards Reciprocating IC Engines. *Computers & Fluids*, 29, 493-524, 2000
  - HEISLER, H. Advanced Engine Technology. Society of Automotive Engineers, *SAE International*, ASIN: 1560917342, 1995
  - HJERTAGER, B. H. Comunicação Pessoal. *1º Workshop de CFD Aplicado à Indústria de Petróleo*, Rio de Janeiro-RJ, 2003.
  - HONG, C. W. and TARNG, S. D. Direct Measurement and Computational Analysis of Turbulence Length Scales of a Motored Engine. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 16, 277-285, 1997
  - HUTCHINSON, B. R. and RAITHBY, G. D. A Multigrid Method Based on the Additive Correction Strategy. *Numerical Heat Transfer*, 9:511-537, 1986.
  - HUTCHINSON, B. R.; GALPIN, P. F. and RAITHBY, G. D. Application of Additive Correction Multigrid to the Coupled Fluid Flow Equations. *Numerical Heat Transfer*, 11:133-147, 1988
  - JOHAN, Z.;MORAES, A. C. M.;BUELL, J. C. and FERENCZ, R. M. In-cylinder cold flow simulation using a finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier Science Limited, 190:3069-3080, 2001
  - KIM, Y.; LEE, S. H. and CHO, N. Effect of Air Motion on Fuel Spray Characteristics in a Gasoline Direct Injection Engine. *SAE Paper*, 1999-01-0177, 1990

- KODAH, Z. H.; SOLIMAN, H. S.; QUDAIS, M. A. and JAHMANY, Z. A. Combustion in a Spark-Ignition Engine. *Combustion and Flame*, Elsevier Science Limited, 123:275-279, 2000
- LAUNDER, B. E. and SPALDING, D. B. The Numerical Computation of Turbulent Flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier Science Limited, Vol. 3, 269-289, 1974
- LEONARD, B. P. A Stable and Accurate Convective Modeling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation. *Computational Methods Applied in Mechanical Engineering*, 19:59-98, 1979
- LILLINGTON, J. N. A Vector Differencing Scheme for Problems in Fluid Flow Involving Significant Source Terms in Steady-State Linear Systems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 1:3-16, 1981.
- MALISKA, C. R. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional. Ed. LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, 1995
- MARCHI, C. H. Esquemas de Alta Ordem para a Solução de Escoamentos de Fluidos sem Dispersão Numérica. *Revista Brasileira de Ciências Mecânicas*, vol. 15, nº 3, p. 231-249, 1993
- MAGNUSSEN, B. F. and HJERTAGER, B. H. On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. *In Proceedings of the 16th Symposium (International) on Combustion*, 1976
- MEIER, H. F. Modelagem Fenomenológica e Simulação Bidimensional de Ciclones por Técnicas da Fluidodinâmica Computacional. Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1998
- MENTER, F. Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications. *AIAA-Journal*, 32(8), 1994
- MILTON, B. E.; BEHNIA, M. and ELLERMAN, D. M. Fuel Deposition and Re-atomisation from Fuel/Air Flows through Engine Inlet Valves. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 22:350-357, 2001.
- NKONGA, B. On the Conservative and Accurate CFD Approximations for Moving Meshes and Moving Boundaries. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Elsevier Science Limited, 190, 1801-1825, 2000

- PATANKAR, S. V. and SPALDING, D. B. A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 15:1787-1806, 1972
- PATANKAR, S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Hemisphere, Washington, USA, 1980.
- PERRY'S CHEMICAL ENGINEERING HANDBOOK, Seventh Edition, International Editions, 1998
- PINCHON, P. Modelling of Fluid Dynamics and Combustion in Piston Engines. *Revue de L'Institut Français Du Pétrole*, Vol. 46, No. 6, 821-844, 1991
- PRAKASH, C. and PATANKAR, S. V. A Control Volume-Based Finite-Element Method for Solving the Navier-Stokes Equations Using Equal-Order Velocity-Pressure Interpolation. *Numerical Heat Transfer*, 8:259-280, 1985
- RAITHBY, G. D. Skew Upstream Differencing Schemes for Problems Involving Fluid Flow. *Computational Methods Applied in Mechanical Engineering*, 9:153-164, 1976
- RAITHBY, G. D. and SCHNEIDER. G. E. Numerical Solutions of Problems in Incompressible Fluid Flow: Treatment of the Velocity-Pressure Coupling *Numerical Heat Transfer*, 2:417-440, 1979
- RHIE, C. M. and CHOW, W. L. Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Airfoil with Trailing Edge Separation. *American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal* , 21(11):1525-1532, November 1983
- RONEL, J. and BALIGA, P. F. A Finite Element Method for Unsteady Heat Conduction in Materials with or without Phase Change. *American Society of Mechanical Engineers Paper 79-WA-HT-54*, American Society of Mechanical Engineers Winter Annual Meeting, USA, 1979
- SCHNEIDER, G. E. and RAW, M. J. A Skewed, Positive Influence Coefficient Upwinding Procedure for Control-Volume-Based Finite Element Convection-Difusion Computation. *Numerical Heat Transfer*, 8:1-26,1986
- SCHNEIDER, G. E. and RAW, M. J. Control-Volume Finite Element Method for Heat Transfer and Fluid Flow Using Co-Located Variables – 1. Computational Procedure. *Numerical Heat Transfer*, 11:363-390,1987

- SPALART, P. R. and ALLMARAS, S. R. An One-equation Turbulence Model for Aerodynamic Flows. *AIAA Paper*, 92-0439, 1992
- STEVENSON, M. J. and CHEN, X. D. Visualization of the Flow Patterns in a High-Pressure Homogenizing Valve Using a CFD Package. *Journal of Food Engineering*, Elsevier Science Limited, 33:151-165, 1997
- THOMPSON, C. P. and WILKES, N. S. Experiments with Higher-Order Finite Differencing Formulae. *AERE-R 10493*, 1982
- VANDOORMAAL, J. P. and RAITHBY, G. D. Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Fluid Flows. *Numerical Heat Transfer*, 7, 147-163, 1984
- VANDOORMAAL, J. P. and RAITHBY, G. D. The Segregated Approach to Predicting Viscous Compressible Fluid Flows. *Journal of Turbomachinery*, 109:268-277, 1987
- VERSTEEG, H. K. and MALALASEKERA, W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method. *Longman Group Ltda*. Longman, England. 1995.
- WERNER, A.; ECHTLE, H.; WIERSE, M. High Performance Simulation Of Internal Combustion Engines. *Proceedings of SC98: High Performance Networking And Computing Conference*, Orlando, USA, 1998
- WESTBROOK, C. K. and DRYER, F. L. Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames. *Combustion Science and Technology*, 27:31-43, 1981
- WILCOX, D. C. Multiscale Model for Turbulent Flows. *In AIAA 24th Aerospace Sciences Meeting*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1986
- YAKHOT, V.; ORSZAG, S. A.; TANGHAM, S.; GATSKI, T. B. and SPECIALE, C. G. Development of Turbulence Models for Shear Flows by a Double Expansion Technique. *Phys. Fluids*, 7:1510-1520, 1992
- YAŞAR, O. A New Ignition Model for Spark-Ignited Engine Simulations. *Parallel Computing*, Elsevier Science Limited, 27:179-200, 2001.

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