

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE PRODUÇÃO E MECÂNICA  
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**Jorge José Sá Filho**

**AVALIAÇÃO NUMÉRICA DO USO DE GNV EM MOTORES DE  
IGNIÇÃO POR COMPRESSÃO COM REATIVIDADE CONTROLADA**

Juiz de Fora

2020

**Jorge José Sá Filho**

**AVALIAÇÃO NUMÉRICA DO USO DE GNV EM MOTORES DE  
IGNIÇÃO POR COMPRESSÃO COM REATIVIDADE CONTROLADA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Faculdade de Engenharia da Universidade Federal de Juiz de Fora, como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Washington Orlando Irrazabal Bohorquez

Juiz de Fora

2020

Ficha catalográfica elaborada através do programa de geração automática da Biblioteca Universitária da UFJF, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Sá Filho, Jorge José.

AVALIAÇÃO NUMÉRICA DO USO DE GNV EM MOTORES DE IGNIÇÃO POR COMPRESSÃO COM REATIVIDADE CONTROLADA

/ Jorge José Sá Filho. -- 2020.

80 p.

Orientador: Washington Orlando Irrazabal Bohorquez  
Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) - Universidade Federal de Juiz de Fora, Faculdade de Engenharia, 2020.

1. RCCI. 2. Diesel. 3. Combustão. 4. CFD. 5. OpenFOAM. I. Irrazabal Bohorquez, Washington Orlando, orient. II. Título.

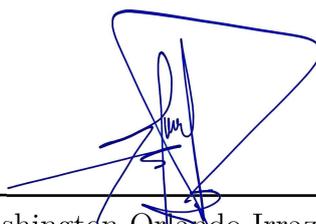
**Jorge José Sá Filho**

**AVALIAÇÃO NUMÉRICA DO USO DE GNV EM MOTORES DE  
IGNIÇÃO POR COMPRESSÃO COM REATIVIDADE CONTROLADA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado  
à Faculdade de Engenharia da Universidade  
Federal de Juiz de Fora, como requisito par-  
cial para a obtenção do título de Bacharel em  
Engenharia Mecânica.

Aprovada em 26 de Novembro de 2020.

**BANCA EXAMINADORA**



---

Prof. Dr. Washington Orlando Irrazabal Bohorquez -  
Orientador  
Universidade Federal de Juiz de Fora

---

Profa. Dra. Yipsy Roque Benito  
Professora  
Universidade Federal de Juiz de Fora

---

Prof. Dr. Raphael Fortes Marcomini  
Professor  
Universidade Federal de Juiz de Fora

## AGRADECIMENTOS

Dedico esta dissertação à minha família, que sempre esteve comigo e me apoiou nos momentos mais difíceis. Principalmente minha mãe, Marta, que sempre lutou para que eu pudesse concluir meus estudos, minha irmã, Maria Alice, que sempre me apoiou nos piores momentos dessa jornada e meu pai Jorge, que mesmo não estando entre nós sempre iluminou meu caminho.

Agradeço a todos os professores do curso de Engenharia Mecânica, que dedicam suas vidas para transmitir o conhecimento necessário para formar profissionais qualificados.

Meu orientador Prof. Dr. Washington Orlando Irrazabal Bohorquez, um exemplo de profissional e ser humano.

"Por vezes sentimos que aquilo que fazemos não é senão uma gota de água no mar. Mas o mar seria menor se lhe faltasse uma gota."

-Madre Teresa

## RESUMO

Motores de ciclo diesel são essenciais na cadeia produtiva e de distribuição de produtos no mundo inteiro, só no Brasil, grande dependente da malha rodoviária e de caminhões, foram consumidos 54,772 bilhões de litros de óleo diesel em 2017. Porém com a crescente demanda de eficiência energética e legislações regulando as emissões dos motores diesel cada vez mais duras, formas de tornar o motor diesel mais limpo e eficiente vem sendo pesquisadas e testadas ao redor do mundo. Uma das inúmeras frentes de pesquisa são os motores RCCI (Reactivity Controlled Compression Ignition), que visam diminuir as emissões de  $NO_x$  e particulados, presentes em maiores concentrações em motores diesel, por meio da introdução de um combustível mais resistente à ignição espontânea, além do óleo diesel. Este estudo visa comparar as emissões, potência e eficiência de um motor Diesel simplificado adaptado ao RCCI utilizando GNV como combustível secundário. Para tal, simulações numéricas com diferentes proporções de GNV e Diesel foram realizadas no software OpenFOAM, incluindo formação do spray, turbulência e química de combustão. Há uma redução nas emissões de  $NO_x$ ,  $CO$  e  $CO_2$ , bem como há um aumento na eficiência térmica sem afetar a potência.

Palavras-chave: RCCI, Diesel, Combustão, CFD, OpenFOAM, GNV.

## ABSTRACT

Diesel engines are an essential part on the production chain and product distribution around the world. Countries like Brazil, are big consumers of diesel due to its dependency on road transport and trucks. In 2017 alone, 54.772 billion liters of diesel were consumed. But with stricter emission regulations new ways of cleaning the diesel engine are in demand. Reactivity Controlled Compression Ignition, RCCI for short, is one of several lines of study regarding NO<sub>x</sub> and particulate reduction in a diesel engine, by using a less reacting fuel as a complement to diesel oil to achieve the reduction. This particular study tries to validate the usage of natural gas as a secondary fuel in a RCCI regime by means of a CFD simulation using OpenFOAM.

Key-words: RCCI, CFD, Diesel, Combustion, VNG.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Motor de combustão interna PSM V18 D500 - Ciclo Otto [1] . . . . .	17
Figura 2 – Componentes Motor de Combustão Interna [2] . . . . .	18
Figura 3 – Funcionamento do Motor 4 Tempos [3] . . . . .	19
Figura 4 – Geometria Básica do Motor [3] . . . . .	20
Figura 5 – Motor Diesel [4] . . . . .	21
Figura 6 – Diagrama Pressão - Ângulo do virabrequim [5] . . . . .	22
Figura 7 – Diagrama P-V Real [5] . . . . .	23
Figura 8 – Diagramas P-V e T-S Teórico [5] . . . . .	23
Figura 9 – Torre de Destilação [6] . . . . .	26
Figura 10 – Curvas de Destilação Típicas [7] . . . . .	27
Figura 11 – Diagrama de Borghi [8] . . . . .	32
Figura 12 – Diagrama de Regime na Combustão Difusiva [8] . . . . .	33
Figura 13 – Simulação Spray - ELSA [9] . . . . .	39
Figura 14 – Conservação em um elemento discreto [10] . . . . .	44
Figura 15 – Estrutura de um Caso no OpenFOAM [11] . . . . .	46
Figura 16 – Malha criada para a simulação . . . . .	47
Figura 17 – Grupos de faces . . . . .	48
Figura 18 – <i>Output checkMesh</i> . . . . .	49
Figura 19 – Perfil da Injeção de Combustível . . . . .	51
Figura 20 – Início da Injeção . . . . .	53
Figura 21 – 5° Depois do Início da Injeção . . . . .	53
Figura 22 – 9° Depois do Início da Injeção . . . . .	54
Figura 23 – 12° Depois do Início da Injeção . . . . .	54
Figura 24 – Pressão x ângulo do Virabrequim . . . . .	55
Figura 25 – Pressão x Volume . . . . .	57
Figura 26 – Concentração molar $CO_2$ - 100% Diesel . . . . .	58
Figura 27 – Concentração molar $CO$ - 100% Diesel . . . . .	58
Figura 28 – Concentração molar $CO_2$ - 75% Diesel . . . . .	59
Figura 29 – Concentração molar $CO$ - 75% Diesel . . . . .	59
Figura 30 – Concentração molar $CO_2$ - 50% Diesel . . . . .	61
Figura 31 – Concentração molar $CO$ - 50% Diesel . . . . .	61
Figura 32 – Concentração molar $CO_2$ - 35% Diesel . . . . .	62
Figura 33 – Concentração molar $CO$ - 35% Diesel . . . . .	62
Figura 34 – Concentração molar $NO_2$ - 100% Diesel . . . . .	64
Figura 35 – Concentração molar $NO$ - 100% Diesel . . . . .	64
Figura 36 – Concentração molar $NO_2$ - 75% Diesel . . . . .	65
Figura 37 – Concentração molar $NO$ - 75% Diesel . . . . .	65
Figura 38 – Concentração molar $NO_2$ - 50% Diesel . . . . .	66

Figura 39 – Concentração molar $NO$ - 50% Diesel . . . . .	66
Figura 40 – Concentração molar $NO_2$ - 35% Diesel . . . . .	67
Figura 41 – Concentração molar $NO$ - 35% Diesel . . . . .	67

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Propriedades Diesel S10 [12] . . . . .	28
Tabela 2 – Propriedades Gás Natural [13] . . . . .	29
Tabela 3 – Energia da Ligação [14] . . . . .	30
Tabela 4 – Geometria do Motor . . . . .	49
Tabela 5 – Composição das simulações . . . . .	50
Tabela 6 – Condições Iniciais de Fronteira . . . . .	52
Tabela 7 – Trabalho, Potência e Eficiência . . . . .	56

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

RCCI	Ignição por compressão de reatividade controlada(reactivity controlled compression ignition)
CFD	Dinâmica de fluidos computacional(computer fluid dynamics)
TC	Centro superior (top center)
BC	Centro inferior (bottom center)
ANP	Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis
PaSR	Reator Parcialmente Mexido (partially stirred reactor)
ELSA	Atomização de Spray Euleriana - Lagrangiana ( Eulerian-Lagrangian spray atomization)
FVM	Método dos Volumes Finitos (finite volume method)
GPL	Licença Pública Geral (general public licence)
FOAM	Field Operation and Manipulation

## LISTA DE SÍMBOLOS

TC	Top-center
BC	Bottom-center
$V_c$	Volume Mínimo do Cilindro
$V_d$	Volume Varrido pelo Pistão
$V_t$	Volume Máximo
$r_c$	Razão de compressão
$\eta_t$	Eficiência Térmica
$W_c$	Trabalho Líquido
$Q_{ij}$	Calor no Fornecido/Retirado no Processo $ij$
$T_i$	Temperatura no Ponto $i$
H	Entalpia
k	Coefficiente de Expansão Adiabática
$C_p$	Capacidade Térmica a Pressão Constante
$C_v$	Capacidade Térmica a Volume Constante
$NO_x$	Óxidos de Nitrogênio
$n$	Número de Mols
$H_f$	Entalpia de Formação
$\rho$	Densidade
$v'$	Flutuações no Campo de Fluxo
$S_L$	Velocidade de queima Adiabática
$l_t$	Escala de Comprimento das Maiores Estruturas
$l_F$	Espessura da Chama
$Da$	Número de Damköhler
$t_\eta$	Escala de Tempo dos Menores Fluxos
$t_R$	Escala de Tempo Química

$Z_{st}$	Grau de Mistura de Combustível e Oxidante
$\Delta Z$	Intervalo de Relevância do Mecanismo Químico
$U$	Velocidade Média
$u$	Velocidade Instantânea
$p$	Pressão
$\mu$	Viscosidade Dinâmica
$Y$	Fração Mássica
$\tilde{Y}$	Fração Mássica de Líquido
$\dot{\omega}_i$	Taxa de Reação Média na Célula
$\omega_i^*$	Taxa de Formação Instantânea da $i$ -ésima Espécie
$\tau^*$	Tempo de Residência
$\kappa$	Fração Volumétrica Ocupada pela Reação
$\tau_c$	Escala de Tempo da Reação
$\tau_{mix}$	Escala de Tempo da Mistura
$k$	Energia Cinética Turbulenta
$\epsilon$	Dissipação da Energia Cinética Turbulenta
$\Omega_{ij}$	Termo de Destruição de Gotículas
$\Phi_{ij}$	Distribuição da Energia Cinética
$\Phi_{ij,1}$	Retorno à Isotropia
$\Phi_{ij,2}$	Deformação Rápida
$\Phi_{ij,w}$	Interação com as Paredes do Domínio
$d_{32}$	Diâmetro Médio das Gotículas

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO . . . . .</b>	<b>15</b>
1.1	Considerações iniciais . . . . .	15
1.2	Motivação . . . . .	15
1.3	Objetivos . . . . .	15
1.3.1	Objetivo Geral . . . . .	15
1.3.2	Objetivo Específico . . . . .	15
1.4	Escopo do Trabalho . . . . .	16
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA . . . . .</b>	<b>17</b>
2.1	Motores a combustão interna . . . . .	17
2.1.1	Operação . . . . .	19
2.1.2	Ciclo Diesel . . . . .	21
2.1.3	Ignição por Compressão com Reatividade Controlada . . . . .	25
2.2	Combustíveis . . . . .	26
2.2.1	Diesel . . . . .	28
2.2.2	Gás Natural . . . . .	29
2.3	Combustão . . . . .	30
2.3.1	Chama Difusiva . . . . .	33
2.3.2	Combustão Turbulenta . . . . .	34
2.3.3	Modelo PaSR . . . . .	35
2.4	O Modelo k- $\epsilon$ de Turbulência . . . . .	37
2.5	Formação de Spray . . . . .	39
2.6	Simulação Numérica . . . . .	44
2.6.1	OpenFOAM . . . . .	46
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA . . . . .</b>	<b>47</b>
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E ANÁLISES . . . . .</b>	<b>53</b>
4.1	Formação do Spray . . . . .	53
4.2	Pressão Interna do Cilindro . . . . .	55
4.3	Potência e Eficiência . . . . .	56
4.4	Emissão de CO e CO <sub>2</sub> . . . . .	58
4.5	Emissão de NO <sub>x</sub> . . . . .	64
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES . . . . .</b>	<b>68</b>
5.1	Sugestões para Trabalhos Futuros . . . . .	69

REFERÊNCIAS . . . . .	70
APÊNDICE A – CONTROLDICT . . . . .	72
APÊNDICE B – FVSCHMES . . . . .	74
APÊNDICE C – FVSOLUTION . . . . .	76
ANEXO A – TERMO DE AUTENTICIDADE . . . . .	79
ANEXO B – PROTOCOLO OPERACIONAL DE PROCEDIMENTOS PARA APRESENTAÇÕES DE TCC DE FORMA REMOTA . . . . .	80

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 Considerações iniciais

Com regulamentações cada vez mais rígidas e um esforço global para a redução das emissões de gases do efeito estufa, técnicas para diminuir a contribuição de motores Diesel estão sendo estudadas. Considerado a dependência nacional com o transporte rodoviário, grande parte dele sendo movido por motores Diesel, e da abundância de recursos como o gás natural uma solução aparente é a utilização de gás natural como combustível secundário em um ciclo Diesel-RCCI.

## 1.2 Motivação

Apresentar uma solução para a redução de gases poluentes na atmosfera, aproveitando os recursos naturais presentes no país.

## 1.3 Objetivos

Estudar o desenvolvimento do escoamento reativo em motores de combustão interna através do processo de combustão devido à ignição por compressão de reatividade controlada (RCCI).

### 1.3.1 Objetivo Geral

Avaliar o desempenho e as emissões poluentes de motor de ignição por compressão simplificado sem mudanças;

Avaliar o desempenho e as emissões poluentes de motor de ignição por compressão simplificado adaptado para RCCI.

### 1.3.2 Objetivo Específico

Adaptar um solver do pacote de CFD aberto OpenFOAM para simular um cilindro simples em período de compressão e expansão, incluindo spray de combustível, o fluxo turbulento no interior do cilindro e a química de combustão.

#### 1.4 Escopo do Trabalho

A seção de fundamentação teórica revisa brevemente os motores a combustão interna, descrevendo a operação e funcionamento dos mesmos e aprofundando-se um pouco mais nos motores ciclo Diesel, com os gráficos característicos deste tipo de motor. Também são abordados os combustíveis utilizados, o processo de combustão, os modelos de turbulência e de formação de spray, conceitos básicos de método dos volumes finitos e CFD com OpenFOAM.

A seguir, a metodologia utilizada no trabalho é abordada. Por fim, uma análise dos dados obtidos nas simulações, avaliando a formação do spray e o movimento da malha, a pressão interna do cilindro, a potência e eficiência do motor e os níveis de emissão para cada combinação de combustíveis.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

### 2.1 Motores a combustão interna

Um motor de combustão interna é uma máquina térmica em que a energia armazenada nas ligações químicas do combustível é transformada em trabalho através da combustão do mesmo dentro do motor, em contraste a um motor de combustão externa, em que a combustão é realizada em uma câmara externa ao motor. A figura 1 ilustra um dos primeiros motores a combustão interna comercialmente viável, o PSM V18 D500 [1].

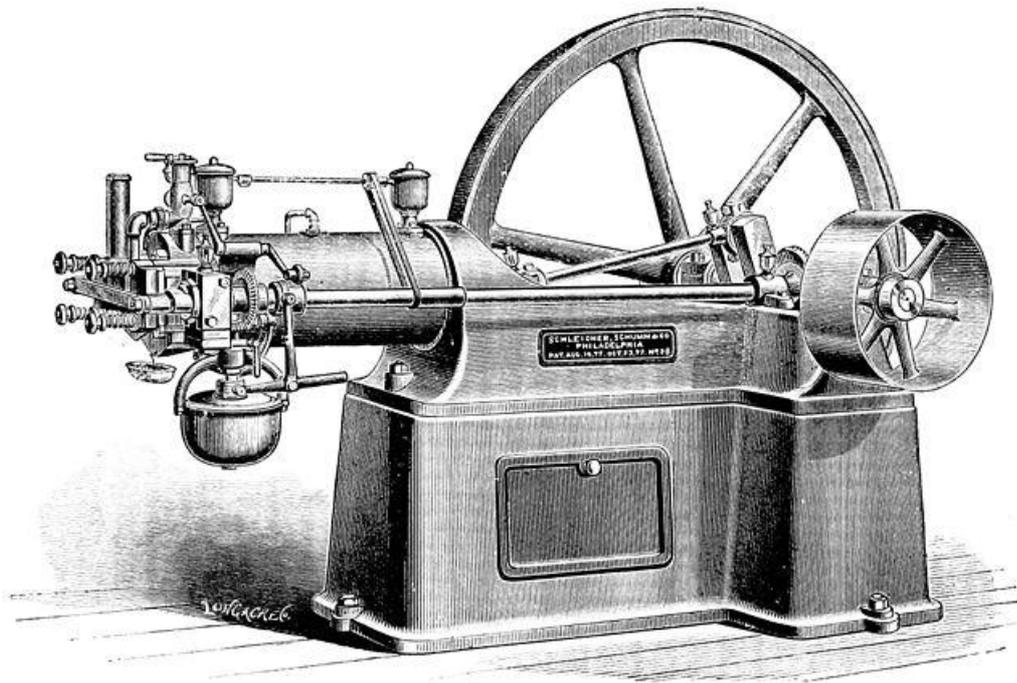


Figura 1 – Motor de combustão interna PSM V18 D500 - Ciclo Otto [1]

A principal geometria utilizada em motores de combustão interna é a do pistão reciprocante - cilindro, que transmite a energia da combustão para um eixo excêntrico, chamado virabrequim, através da biela. Válvulas ou janelas são utilizadas para controlar o fluxo de gás entrando e saindo do motor [3].

Esta configuração de motor de combustão interna, constituída por bloco do motor, pistões, bielas, virabrequim e válvulas continua a mesma desde o final do século 19 [15]. O primeiro motor de combustão interna por faísca foi desenvolvido por Otto em 1876 e em 1892 Diesel é o primeiro a criar um motor de combustão interna por compressão [3].

A invenção do motor a combustão interna revolucionou o mundo, antes de sua concepção, trabalhos eram realizados de forma manual ou por motores à vapor, muito maiores e perigosos. Sua miniaturização tornou possível a utilização em veículos pessoais, e o aumento de sua eficiência e potência possibilitou a criação de barcos e locomotivas

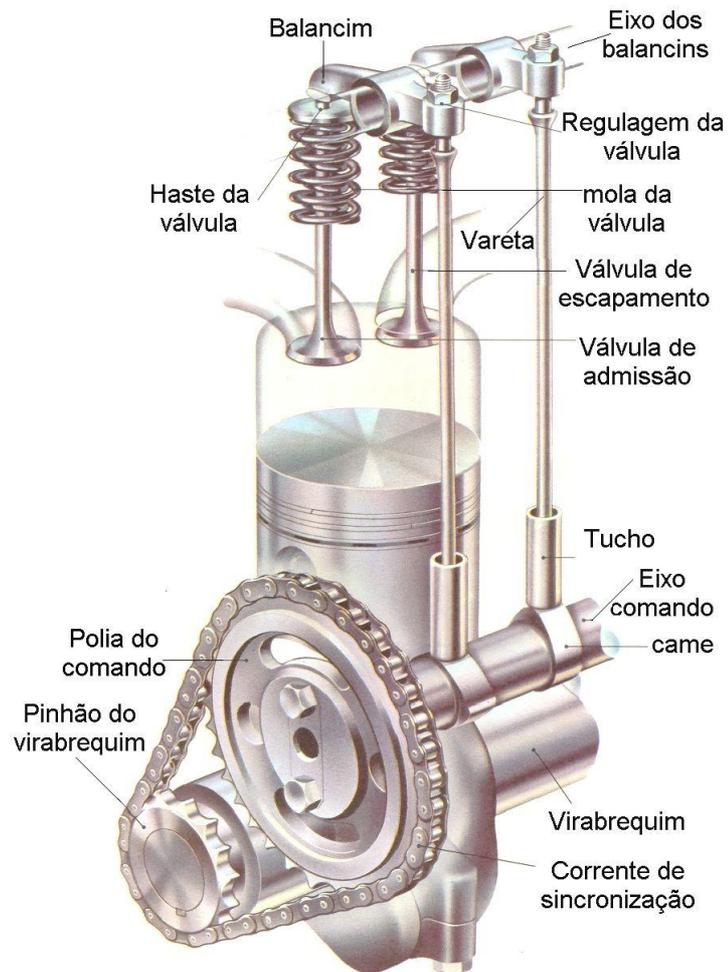


Figura 2 – Componentes Motor de Combustão Interna [2]

movidas a gasolina ou diesel [5].

Mesmo com mais de um século de desenvolvimento contínuo motores a combustão interna continuam a evoluir, novas tecnologias em materiais reduzem o peso dos motores e, avanços em eletrônica e controle melhoram a eficiência aumentam a potência e reduzem as emissões de gases causadores do efeito estufa e doenças pulmonares relacionadas a poluição.

### 2.1.1 Operação

Este trabalho tem foco nos motores de combustão interna por compressão de quatro tempos, ou seja, para completar o ciclo de trabalho o virabrequim realiza duas revoluções e o pistão move-se no cilindro quatro vezes.

No curso do pistão há dois pontos de parada, top-center (TC) e bottom-center (BC), de acordo com a posição do virabrequim. O volume mínimo do cilindro é chamado de volume morto  $V_c$  e o volume varrido pelo pistão  $V_d$  é a diferença entre o volume total  $V_t$  e o volume morto. A razão entre o volume máximo  $V_t$  e o volume morto  $V_c$  é chamada de razão de compressão  $r_c$  e pode variar entre 8 e 12 para motores de combustão por faísca e entre 12 a 24 para motores de combustão por compressão.

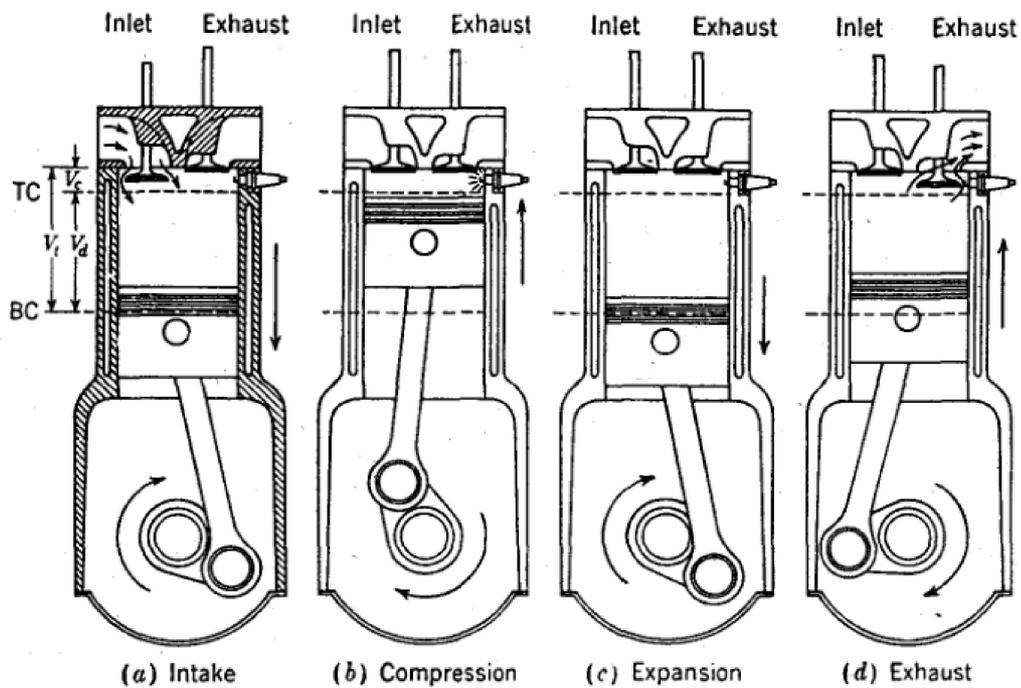


Figura 3 – Funcionamento do Motor 4 Tempos [3]

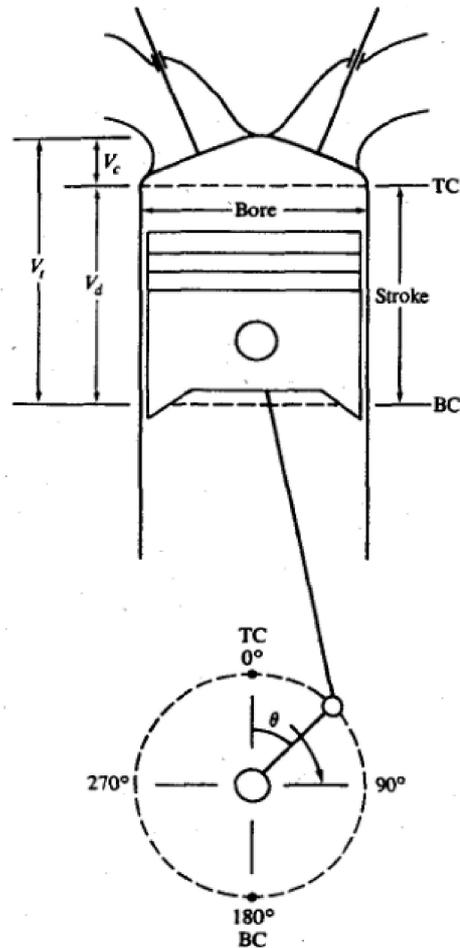


Figura 4 – Geometria Básica do Motor [3]

Considera-se o primeiro tempo como o curso do pistão para realizar a aspiração (*a* na figura 3). Neste tempo, o movimento do pistão, iniciado em TC, combinado à abertura das válvulas de entrada cria uma zona de baixa pressão no interior do cilindro que aspira ar puro ou uma mistura de ar/combustível.

No curso seguinte (*b* na figura 3), com as válvulas fechadas, o pistão comprime a mistura no interior do cilindro para o volume morto  $V_c$ . No final deste curso incia-se a combustão e, no caso de motores com injeção direta de combustível, o combustível é atomizado.

O terceiro (*c* na figura 3) curso do pistão é considerado o curso de potência, onde a expansão do gás com temperatura e pressão extremas "empurra" o pistão. O trabalho realizado pelo gás neste curso é quase cinco vezes maior que o trabalho realizado pelo pistão na compressão [3]. A válvula de exaustão começa a abrir no final deste ciclo.

Por fim, com a válvula de exaustão aberta, o pistão "empurra" os gases no interior do cilindro pela válvula de exaustão (*d* na figura 3).

### 2.1.2 Ciclo Diesel

Motores de combustão por compressão, mais conhecidos por motores Diesel, são motores em que o processo de combustão se inicia quando a pressão no interior é alta o suficiente para a temperatura da mistura ser superior à temperatura de auto-ignição do combustível. Geralmente, o processo de compressão é iniciado com ar puro no cilindro e o combustível é injetado momentos antes da combustão em si, aproximadamente 20° antes de TC, para haver tempo de atomização e evaporação do combustível antes da queima. O controle de carga é feito variando a quantidade de combustível injetado e o fluxo de ar se mantém estável.



Figura 5 – Motor Diesel [4]

Motores que empregam o ciclo Diesel são mais pesados e alcançam velocidades mais baixas quando comparados a motores de ignição por faísca pois alcançam pressões mais altas necessitando assim de peças mais fortes e pesadas.

O diagrama a seguir caracteriza o comportamento da pressão interna de um motor Diesel naturalmente aspirado de quatro tempos. O diagrama foi obtido através do uso de um indicador de pressão instalado no cilindro, cujo tambor estava sincronizado com o movimento do pistão [5].

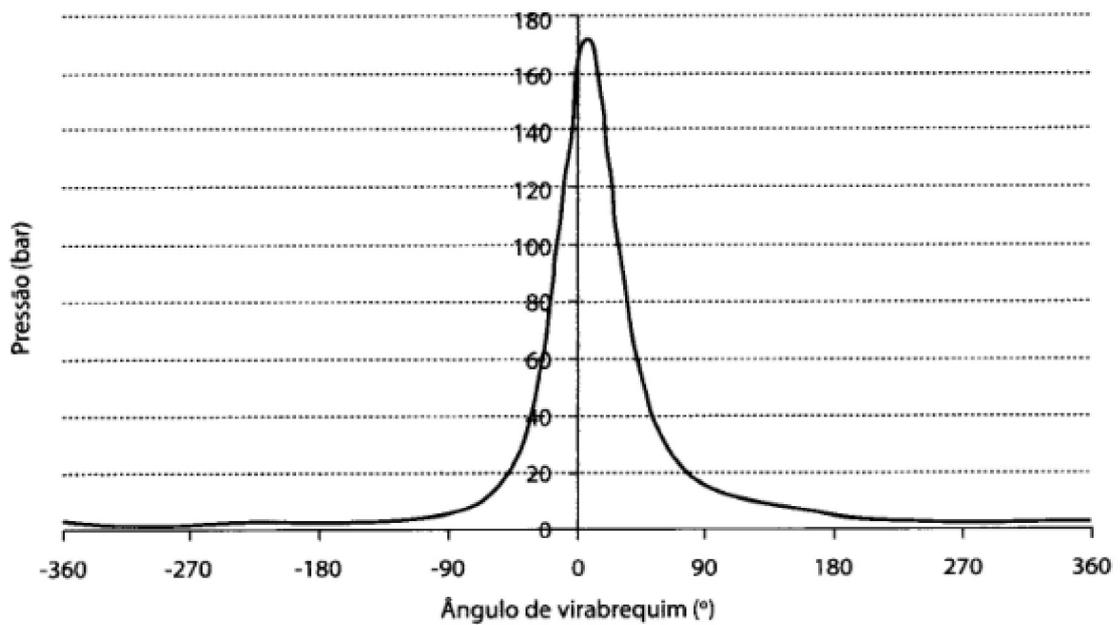


Figura 6 – Diagrama Pressão - Ângulo do virabrequim [5]

Para modelar o ciclo Diesel padrão certas considerações precisaram ser feitas. Os processos de compressão e expansão são isoentrópicos e o processo de fornecimento de calor ao fluido de trabalho é isobárico [5]. O gráfico Pressão - Volume a seguir ilustra o processo ideal modelado:

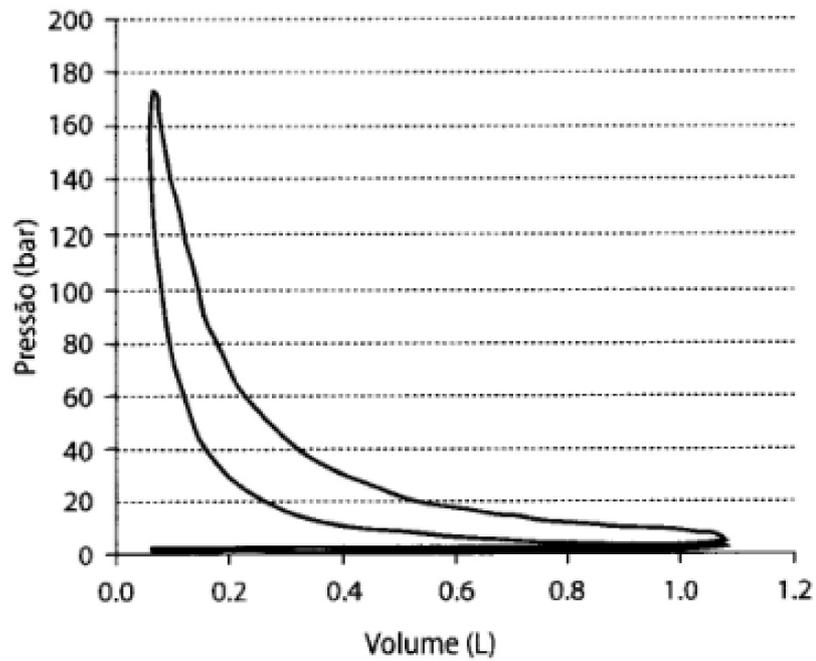


Figura 7 – Diagrama P-V Real [5]

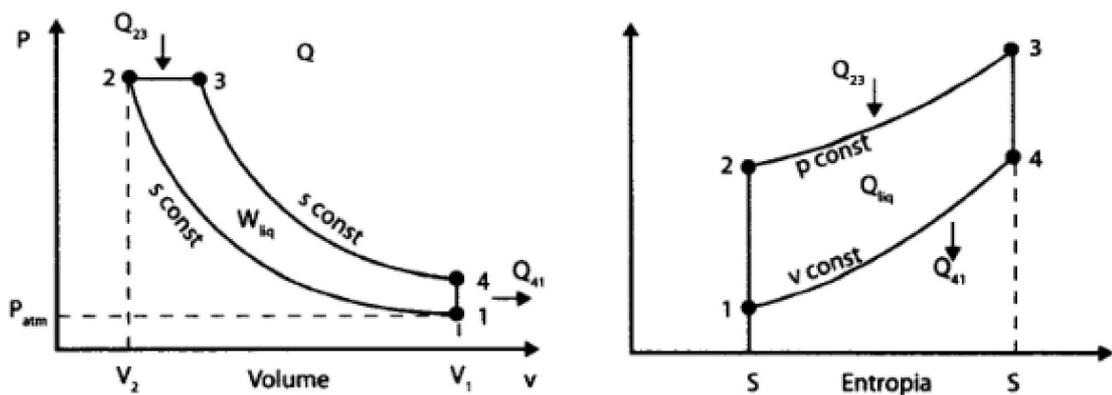


Figura 8 – Diagramas P-V e T-S Teórico [5]

A área 1-2-3-4 nestes gráficos é o trabalho líquido do motor  $W_c$ , no caso do gráfico T-S  $W_c = Q_u = Q_{23} - Q_{41}$ . A eficiência térmica é dada por:

$$\eta_t = \frac{W_c}{Q_{23}} = \frac{Q_{23} - Q_{41}}{Q_{23}} = 1 - \frac{Q_{41}}{Q_{23}} \quad (2.1)$$

Pela primeira lei da termodinâmica:

$$Q_{23} - W_{23} = U_3 - U_2 \quad (2.2)$$

E como a adição de calor é um processo isobárico:

$$W_{23} = \int_2^3 p dV = p(V_3 - V_2) \quad (2.3)$$

O que resulta em:

$$Q_{23} - p(V_3 - V_2) = U_3 - U_2 \rightarrow Q_{23} = (U_3 + pV_3) - (U_2 + pV_2) \quad (2.4)$$

Da definição da entalpia:  $U + pV = H$  e admitindo um gás perfeito:  $\Delta H = mC_p\Delta T$ ,  $Q_{23}$  resulta em:

$$Q_{23} = mC_p(T_3 - T_2) \quad (2.5)$$

e  $Q_{41}$  em:

$$Q_{41} = mC_v(T_4 - T_1) \quad (2.6)$$

Substituindo as equações (2.5) e (2.6) na equação (2.1):

$$\eta_t = 1 - \frac{1}{k} \frac{(T_4 - T_1)}{(T_3 - T_2)} = 1 - \frac{1}{k} \frac{T_1}{T_2} \left( \frac{\frac{T_4}{T_1} - 1}{\frac{T_3}{T_2} - 1} \right) \quad (2.7)$$

Por ser compressão e expansão isoentrópicas, tem-se que:  $\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{v_1}{v_2}\right)^{k-1}$  e  $\frac{T_4}{T_3} = \left(\frac{v_3}{v_4}\right)^{k-1}$ . Como  $v_4 = v_1$ ,  $\frac{v_3}{v_2} = \frac{T_3}{T_2}$  e agrupando termo a termo, a equação para eficiência térmica do ciclo diesel é:

$$\eta_t = 1 - \frac{1}{k} \left(\frac{v_2}{v_1}\right)^{k-1} \left[ \frac{\left(\frac{T_3}{T_2}\right)^k - 1}{\frac{T_3}{T_2} - 1} \right] \quad (2.8)$$

### 2.1.3 Ignição por Compressão com Reatividade Controlada

Para reduzir a formação de gases poluentes e particulado em motores Diesel sem perder a alta eficiência térmica inerente ao ciclo, novas estratégias de ignição por compressão estão sendo propostas. Uma dessas propostas é a ignição por compressão com reatividade controlada (do inglês, RCCI).

A formação de  $NO_x$  é diretamente proporcional a temperatura de chama [16]. Para atingir a redução da temperatura um segundo combustível, menos reativo, é introduzido no cilindro criando uma mistura homogênea de combustível e ar. O combustível menos reativo precisa de mais energia para entrar em combustão, diminuindo a quantidade de energia disponível no sistema para as reações de dissociação do  $N_2$  e subsequente oxidação dos radicais livres de  $N$ .

O conceito mostrou-se promissor em estudos utilizando iso-octano prémisturado e diesel injetado [17], bio-diesel pré-misturado e diesel injetado, etanol-diesel, gasolina-biodiesel [18], misturas de butanol e diesel [19], entre outros. Nenhum trabalho prévio combinando GNV e Diesel foi encontrado no tempo em que este trabalho foi escrito.

## 2.2 Combustíveis

Motores de combustão interna podem ser abastecidos por diversos tipos de combustível, incluindo gasosos, líquidos e até sólidos. As características dos combustíveis atuam diretamente no desempenho dos motores, em sua confiabilidade e eficiência. Apesar dos avanços dos veículos elétricos e movidos a combustíveis alternativos, como gás hidrogênio e etanol, a grande maioria dos veículos em circulação no mundo atualmente são abastecidos por combustíveis derivados do petróleo.

Petróleo é o nome dado a uma mistura de diversas frações de hidrocarbonetos de diferentes massas molares que é encontrado na natureza. Ele é formado ao longo de milhões de anos quando Zooplâncton e algas são enterrados em bacias sedimentares e sofrem pressões e temperaturas altas. A composição exata do petróleo depende da região de onde ele foi extraído [7].



Figura 9 – Torre de Destilação [6]

O processo de refino do petróleo cru se inicia com uma destilação a pressão ambiente, onde as frações são separadas de acordo com a volatilidade. Estes destilados podem então serem novamente processados para a diminuição das cadeias de hidrocarbonetos, conhecido como *cracking*. Na produção de plásticos ocorre o processo contrário, onde as moléculas são incentivadas a crescerem, conhecido como polimerização.

Os subprodutos obtidos através da destilação atmosférica seguem curvas específicas de acordo com a temperatura e a porcentagem evaporada.

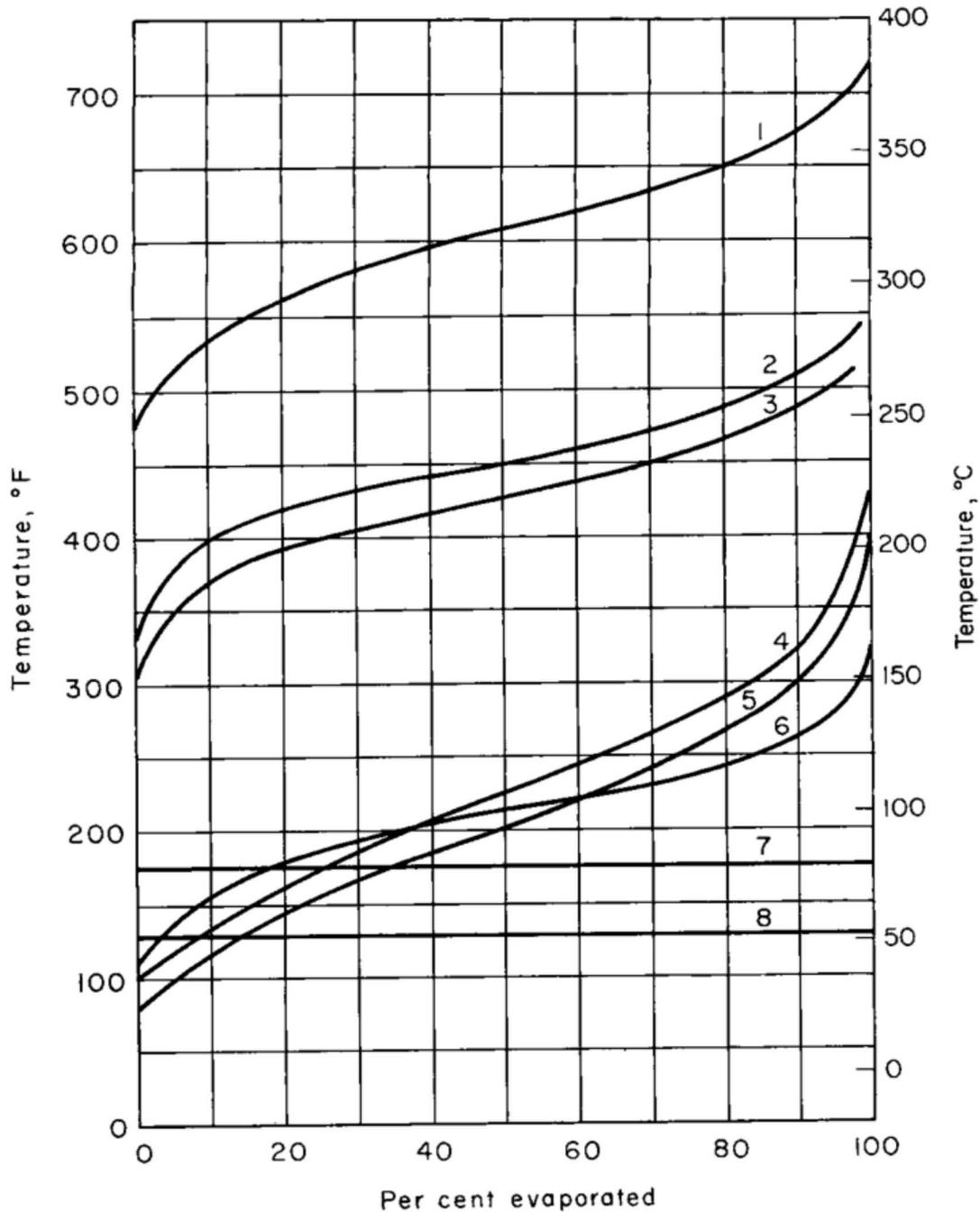


Figura 10 – Curvas de Destilação Típicas [7]

A curva 1 representa a destilação do Diesel; a 2 do destilado; 3 do querosene; 4 da gasolina "de verão"; 5 da gasolina "de inverno"; 6 da gasolina de aviação; 7 do álcool etílico; 8 do benzeno.

## 2.2.1 Diesel

Diesel combustível é uma mistura complexa de várias classes de hidrocarbonetos: parafinas, naftalenos, aromáticos e olefínicos em quantidades menores. A produção do diesel é realizada de tal forma a atender as especificações e regulamentações, o que não garante a distribuição dos hidrocarbonetos no combustível apesar das características do combustível serem diretamente influenciadas por esta distribuição [20].

No Brasil, a regulamentação do Diesel combustível é feita pela ANP (Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis). De acordo com a resolução ANP nº 50, de 23 de dezembro de 2013, as características do Diesel S10 (teor de enxofre máximo de 10 *mg/kg*) são dadas pela seguinte tabela:

Característica	Unidade	Limite
Aspecto	-	Límpido e Isento de impurezas
Cor	-	Usualmente de incolor a amarelada, podendo apresentar-se ligeiramente alterada para as tonalidades marrom e alaranjada devido à coloração do biodiesel.
Cor ASTM, máx.	-	3,0
Teor de biodiesel	% volume	11 ± 0,5%
Enxofre total, máx.	<i>mg/kg</i>	10,0
10 % vol., recuperados, mín.	°C	180,0
50 % vol., recuperados	°C	245,0 a 295,0
85 % vol., recuperados, máx.	°C	-
95% vol., recuperados, máx	°C	370,0
Massa específica a 20°C	<i>kg/m<sup>3</sup></i>	815,0 a 850,0
Ponto de fulgor, mín.	°C	38,0
Viscosidade Cinemática a 40°C	<i>mm<sup>2</sup>/s</i>	2,0 a 4,5
Número de cetano, mín.	-	48
Resíduo de carbono Ramsbottom no resíduo dos 10% finais da destilação, máx.	% massa	0,25
Cinzas, máx.	% massa	0,010
Corrosividade ao cobre, 3h a 50°C, máx	-	1
Teor de Água, máx.	<i>mg/kg</i>	200
Contaminação total, máx.	<i>mg/kg</i>	24
Hidrocarbonetos policíclicos aromáticos, máx.	% massa	11
Estabilidade à oxidação, máx.	<i>mg/100mL</i>	2,5
Lubricidade, máx	<i>μm</i>	520
Condutividade elétrica, mín.	<i>pS/m</i>	25
Poder Calorífico Inferior	<i>MJ/kg</i>	43

Tabela 1 – Propriedades Diesel S10 [12]

### 2.2.2 Gás Natural

O gás natural é uma substância gasosa, inodora e incolor em condições atmosféricas normais. Aproximadamente 90% da fração molar do gás natural é de metano ( $CH_4$ ) [21] e possui traços de outros compostos orgânicos, como o etano ( $C_2H_6$ ) e o propano ( $C_3H_8$ ). Ele pode ser dividido em duas categorias: associado e não associado.

O gás natural associado é aquele obtido diretamente do processo de extração do petróleo como um subproduto. Ele se encontra dissolvido no petróleo ou como uma bolha no poço. Neste caso a extração do petróleo é privilegiada, utilizando-se o gás natural para manter a pressão no interior do poço.

O gás natural não associado é aquele que está livre na camada rochosa e a extração dele é feita de forma direta. Gás natural pode também ser obtidos através da destilação e, por possuir hidrocarbonetos com menores massas molares, é o primeiro a ser obtido. Ele pode ser utilizado para queima em estações termoeletricas, para aquecimento residencial, uso em alto fornos e em veículos.

O controle do gás natural no Brasil é regido pela ANP e sua qualidade é estabelecida pela resolução ANP nº 16/2008. A tabela a seguir determina as características principais estabelecidas por esta resolução para as regiões centro-oeste, sul e sudeste:

<b>Característica</b>	<b>Unidade</b>	<b>Limite</b>
Poder calorífico superior	$kJ/m^3$	35.000 a 43.000
Índice de Wobbe	$kJ/m^3$	46.500 a 53.500
Número de metano, mín.	-	65
Metano, mín.	% mol.	85,0
Etano, máx.	% mol.	12
Propano, máx.	% mol.	6,0
Butanos e mais pesados, máx.	% mol.	3,0
Oxigênio, máx. (7)	% mol.	0,5
Inertes ( $N_2+CO_2$ ), máx.	% mol.	6,0
$CO_2$ , máx.	% mol.	3,0
Enxofre Total, máx.	$mg/m^3$	70
Gás Sulfídrico ( $H_2S$ ), máx.	$mg/m^3$	10
Ponto de orvalho de água a 1atm, máx.	$^{\circ}C$	-45
Ponto de orvalho de hidrocarbonetos a 4,5 MPa, máx.	$^{\circ}C$	0

Tabela 2 – Propriedades Gás Natural [13]

### 2.3 Combustão

Combustão é o termo generalizado para uma reação química de oxidação altamente exotérmica, onde a energia armazenada nas ligações químicas é subitamente liberada. A ligação entre átomos de uma molécula pode ser classificada de duas maneiras: covalente e iônica. A soma da energia armazenada em cada ligação da molécula é a energia total da molécula.

Para dissociar moléculas em átomos é necessário fornecer energia para quebrar as ligações internas da molécula. Em materiais ditos energéticos, a quebra destas ligações libera energia ao invés de absorver energia. A tabela a seguir exemplifica algumas das ligações energéticas:

Ligação Química	Energia da Ligação <i>kJ/mol</i>
C-H	411
C-C	358
C=C	599
C≡C	812
C-O	350
C=O (Cetona)	766
C=O (Formaldeído)	699
C=O (Acetaldeído)	720
C≡N	883
H-H	435
O-H	465
O-O	138
N-H	368
N-O	255
N=O	601
N=N	443
N≡N	947

Tabela 3 – Energia da Ligação [14]

Quando um reagente R de um material energético reage e produz um produto P calor será liberado ou absorvido de acordo com a diferença entre a energia de P e R. A entalpia de formação de cada molécula depende da estrutura da mesma, das ligações presentes e da temperatura [14].

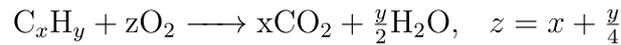
A energia liberada em forma de calor é dada pela diferença da entalpia de formação dos produtos e reagentes.

$$Q_1^0 = \sum_i n_i(\Delta H_f^0)_{T_0,i} - \sum_j n_j(\Delta H_f^0)_j \quad (2.9)$$

$$Q_2^0 = \sum_j n_j(H_{T_f} - H^0)_j - \sum_i n_i(H_{T_1} - H^0)_i \quad (2.10)$$

Onde  $n$  é o número de mols da espécie envolvida na reação, os subscritos  $i$  e  $j$  representam os reagentes e produtos respectivamente,  $T_1$  a temperatura inicial,  $T_0$  a temperatura no qual o calor de formação é definido e  $H_f$  a entalpia de formação.  $T_f$  e  $n_j$  são determinados quando  $Q_1 = Q_2$ . Essas equações demonstram que o "caminho" que a reação segue influencia na quantidade de calor liberada.

Uma reação de combustão de um combustível orgânico pode ser escrita em termos da equação global:



Porém, em um processo de combustão real existem diversas reações e espécies entre o início e o fim. Os processos reais são chamados de mecanismos e são estudados profundamente para melhor compreender o fenômeno. A complexidade do mecanismo irá depender do tamanho da molécula de combustível estudada e da precisão escolhida para a simulação. Sub mecanismos como os de formação de poluentes e material particulado podem ser incluídos ou omitidos dependendo da aplicação.

Afim de simplificar a computação da combustão de combustíveis complexos como os derivados de petróleo, *surrogates* são utilizados. Eles utilizam um ou mais hidrocarbonetos que visam emular as características da queima dos combustível alvo sem precisar calcular as equações para as misturas complexas.

O mecanismo escolhido para este trabalho foi desenvolvido por Seidel et al, e descreve a combustão de n-Heptano como *surrogate* para óleo Diesel [22]. Ele possui 56 espécies e 206 reações, descreve a formação de  $NO_x$  e possui pequena margem de erro e menor custo computacional quando comparado a mecanismo completos. Além disso, a biblioteca que descreve o comportamento do n-Heptano em estado líquido já é bem definida no software OpenFOAM.

O processo de combustão pode ser caracterizado de duas maneiras: a combustão pre-mixada, em que o combustível e o oxidante formam uma fase homogênea e a combustão difusiva, em que o processo de mistura do combustível com o oxidante ocorre de forma concomitante com a reação química. Independentemente do tipo de combustão, o processo segue os mesmos princípios de conservação de massa, fração molar, energia e momento [8].

Para classificar os diferentes tipos de chamas o diagrama de Borghi é utilizado. Em sua tese, Peters [23] modificou o diagrama para melhor incorporar os avanços nos modelos. Os regimes de combustão são definidos em termos da escala de velocidade  $v'/S_L$ , onde  $v'$  são as flutuações no campo de fluxo e  $S_L$  é a velocidade de queima adiabática; e a escala de comprimento  $l_t/l_F$ , onde  $l_t$  são as escalas de comprimento das maiores estruturas de fluxo e  $l_F$  é a espessura da chama.

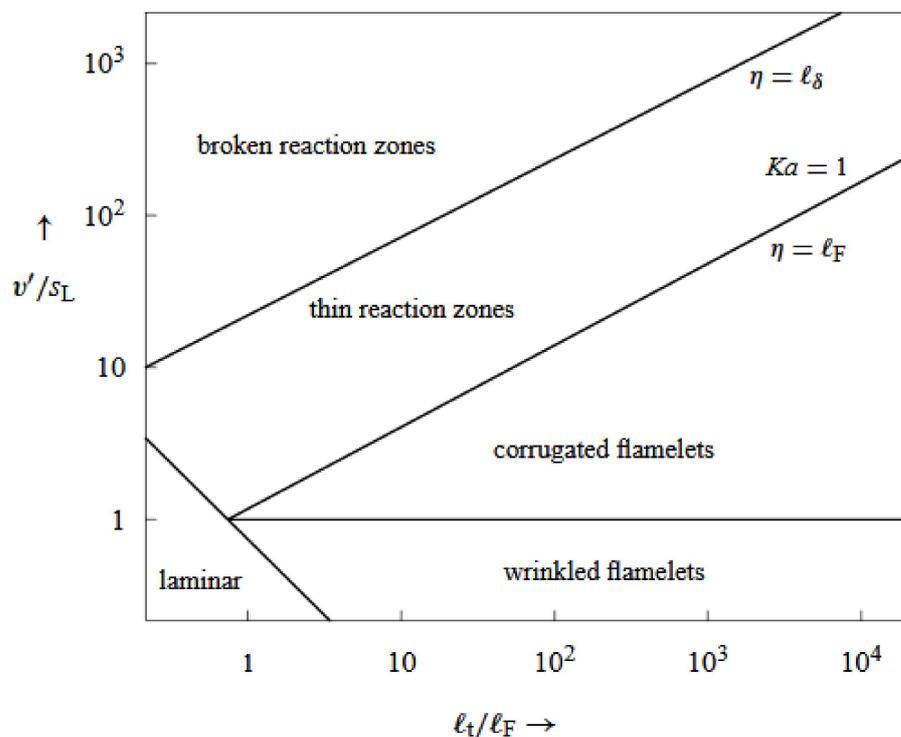


Figura 11 – Diagrama de Borghi [8]

Além do tipo de chama, um processo de combustão pode ser descrito pelo escoamento geral do fluido de trabalho. Nas aplicações de motores no geral, o escoamento turbulento caracteriza a combustão, independente do tipo do motor de combustão interna. Em motores de ignição por compressão (ciclo Diesel) ocorre uma combustão turbulenta difusiva.

### 2.3.1 Chama Difusiva

Em um processo de combustão em que o combustível e o oxidante não estão pré-mixados o processo de mistura difusiva é o fator que mais controla a taxa de combustão. Pelas temperaturas altas que tal processo alcança, as reações químicas ocorrem muito rapidamente. O diagrama a seguir define o regime de combustão pré-mixada [23]:

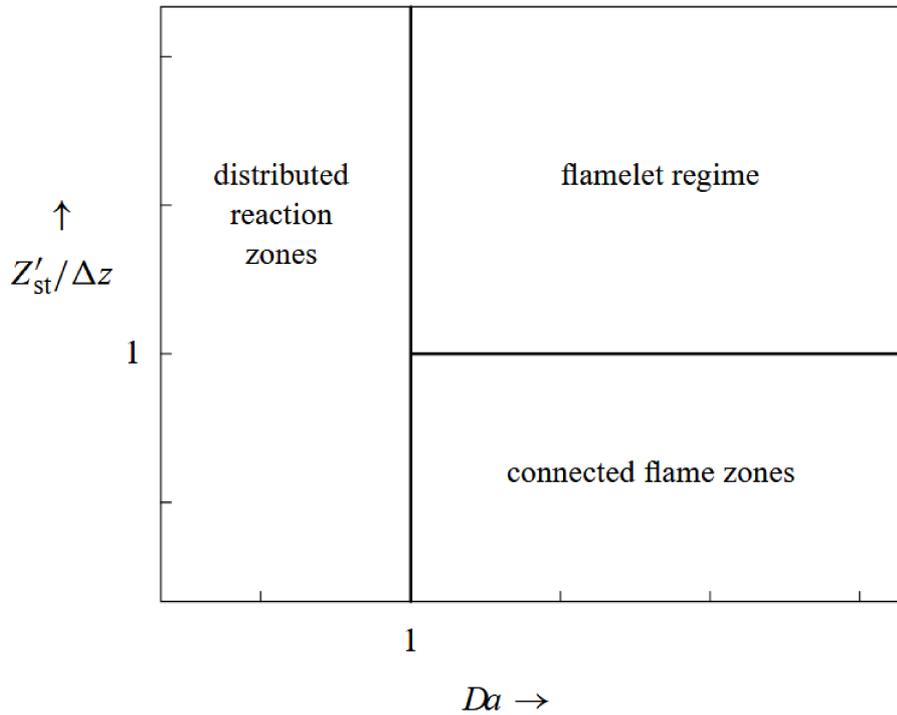


Figura 12 – Diagrama de Regime na Combustão Difusiva [8]

Chamas difusivas não possuem comprimento e velocidade de queima característicos, portanto o diagrama é dado em função do número de Damköhler  $Da = t_\eta/t_R$ , onde  $t_\eta$  é a escala de tempo típica dos menores fluxos e  $t_R$  é a escala de tempo química. Caso  $Da < 1$  há extinção da chama e para  $Da > 1$  é considerado um regime de chama.  $Z_{st}$  é o grau de mistura de combustível e oxidante na frente de chama. Caso o grau de mistura seja muito maior que  $\Delta Z$ , que representa o intervalo em que a taxa de mistura é relevante para o mecanismo químico, as frentes de chama se tornam finas e se mantêm separada pelo fluxo turbulento, caso contrário, a frente de chama se torna mais espessa e o fluxo turbulento conecta todas as frentes de chama.

### 2.3.2 Combustão Turbulenta

O modelo estatístico apresentado por Schreel et al. [8], descreve a chama difusiva. A conservação de massa é expressa por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i}{\partial z_i} = 0 \quad (2.11)$$

A equação de Navier-Stokes descreve a conservação de momento:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho U_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho U_j U_i = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} T_{ij} \quad (2.12)$$

Onde  $p$  é a pressão e  $T_{ij}$  é o tensor de viscosidade. Considerando o fluido de trabalho Newtoniano, o tensor contém apenas efeitos de cisalhamento:

$$T_{ij} = -\mu \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \mu \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.13)$$

Onde  $\mu$  é a viscosidade dinâmica. A equação de conservação de fração mássica das espécies,  $Y$  é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho Y_\alpha + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho U_j Y_\alpha = -\frac{\partial}{\partial x_j} J_j^\alpha + \rho S_\alpha(Y) \quad (2.14)$$

Onde  $J_j^\alpha$  é o termo que representa o fluxo difusivo e  $S_\alpha$  é o termo de fonte de reação química. Quando se desconsidera os efeitos de difusão térmica,  $J_j^\alpha$  é expresso pela seguinte equação:

$$J_j^\alpha = -\rho \mathbb{D} \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \quad (2.15)$$

### 2.3.3 Modelo PaSR

O modelo PaSR (Partially Stirred Reactor - Reator Parcialmente Misturado) é um dos modelos para combustão difusiva em simulações numéricas e foi utilizado na formação deste trabalho. Este modelo utiliza uma aproximação dinâmica local para calcular o ritmo de mistura das espécies participantes da combustão e cada célula computacional é dividida em duas partes: uma com a mistura reagente e outra com mistura não reagente. A área em que ocorre reação é tratada como um reator perfeitamente misturado, onde a composição é homogênea [24]. O cálculo da taxa de reação média de cada célula  $\dot{\omega}_i$  é dada por [25]:

$$\dot{\omega}_i = \kappa \frac{\bar{\rho}(Y_i^* - Y_i^0)}{\tau^*} \quad (2.16)$$

Onde  $\bar{\rho}$  é a média de Reynolds da densidade,  $Y_i^*$  e  $Y_i^0$  são as  $i$ -ésimas frações mássicas das espécies nas regiões reativas e não reativas respectivamente e  $\tau^*$  representa o tempo de residência na estrutura de reação.

Para representar a fração do volume ocupada pela reação,  $\kappa$ , utiliza-se a fração entre a escala de tempo química,  $\tau_c$  e a soma da escala de tempo química com a escala de tempo da mistura  $\tau_{mix}$  de tal forma que:

$$\kappa = \frac{\tau_c}{(\tau_c + \tau_{mix})} \quad (2.17)$$

Pela região reativa de cada célula ser considerada um reator perfeito, a fração mássica das espécies reativas é obtida através da seguinte diferencial:

$$\frac{dY_i^*}{dt} = \frac{\omega_i^*}{\rho} \quad (2.18)$$

Onde o termo  $\omega_i^*$  é a taxa de formação instantânea da  $i$ -ésima espécie. Para estimar  $\tau_c$  Chomiak e Karlsson [25] basearam seus cálculos na taxa de formação das espécies de combustível e oxidante:

$$\frac{1}{\tau_c} = \max \left( \frac{-\dot{\omega}_F}{Y_F}, \frac{-\dot{\omega}_O}{Y_O} \right) \quad (2.19)$$

Onde  $\dot{\omega}$  é a taxa de conversão global,  $Y$  é a fração mássica das espécies com os subscritos  $F$  e  $O$  representando combustíveis e oxidantes respectivamente.

A escala de tempo da mistura  $\tau_{mix}$  é calculada através dos parâmetros de  $k$  e  $\epsilon$  da turbulência [25]

$$\tau_{mix} = C_{mix} \frac{k}{\epsilon} \quad (2.20)$$

Onde  $k$  é a energia cinética turbulenta,  $\epsilon$  é a taxa de dissipação da energia turbulenta e  $C_{mix}$  é uma constante de mistura, que varia de 0,001 a 0,3, de acordo com a fração da célula em que a combustão é considerada homogênea [26].

## 2.4 O Modelo $k-\epsilon$ de Turbulência

Ao longo dos anos, diversos modelos para descrever fluxos turbulentos de fluidos foram criados, como o de Smagorinsky e o de Prandtl. Porém o modelo mais utilizado atualmente foi introduzido por Launder e Spalding em 1972 e expandido em 1980 por Patankar. Chamado de modelo  $k - \epsilon$  por ser definido por duas equações: uma para  $k$  - energia cinética turbulenta e uma para  $\epsilon$  - a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, possui um bom compromisso entre simplicidade e generalidade.

A caracterização do modelo foi obtida do livro *Analysis of the  $k$ -epsilon Turbulence Model* de Bijan Mohammadi e Olivier Pironneau [27].

O modelo  $k - \epsilon$  começa a partir de uma hipótese de Reynolds para a equação de Navier-Stokes:

$$u = U + u', \quad \langle u' \otimes u' \rangle = -R(k, \epsilon, \nabla U + \nabla U^T) \quad (2.21)$$

$$\partial_t U + U \nabla U + \nabla P - \nabla \cdot R - \nu \nabla U = 0, \quad \nabla \cdot U = 0 \quad (2.22)$$

E um conjunto de hipóteses:

- Invariância de referência e fluxo 2D médio  $v_T$  função de  $k$  e  $\epsilon$ .
- $u'^2$  e  $|\nabla \times u'|^2$  são escalares passivos quando transportados por convecção por  $U + u'$ .
- Ergodicidade permite as médias estatísticas se tornarem médias espaciais.
- Homogeneidade local da turbulência.
- Hipótese de Reynolds para  $\langle \omega \otimes \omega \rangle$
- E, por fim,  $\langle |\nabla \times \omega'|^2 \rangle = c_2 \epsilon^2 / k$

Onde  $c_2$  é uma constante.

A hipótese de Reynolds para (2.19) mostra que o tensor  $\langle u' \otimes u' \rangle$  de velocidade instantânea é função de  $k$ ,  $\epsilon$ , da velocidade média do fluido  $U$  e da temperatura. A equação (2.20) representa o fluxo médio  $U$  e a pressão média  $P$  em termos de uma média de Reynolds para a equação de Navier-Stokes.

Com isso, pode-se propor uma equação para o tensor de Reynolds  $\nabla.R$ :

$$\nabla.R = c_\mu \nabla \cdot \left[ \frac{k^2}{\epsilon} (\nabla U + \nabla U^T) \right] \quad (2.23)$$

Onde  $k$  e  $\epsilon$  são dados por  $k = \frac{1}{2} \langle |u'|^2 \rangle$  e  $\epsilon = \frac{\nu}{2} \langle |\nabla u' + \nabla u'^T|^2 \rangle$  respectivamente e são modelados por:

$$\partial_t k + U \nabla k - \frac{c_\mu k^2}{2 \epsilon} |\nabla U + \nabla U^T|^2 - \nabla \cdot \left( c_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \right) + \epsilon = 0 \quad (2.24)$$

$$\partial_t \epsilon + U \nabla \epsilon - \frac{c_1 k}{2} |\nabla U + \nabla U^T|^2 - \nabla \cdot \left( c_\epsilon \frac{k^2}{\epsilon} \nabla \epsilon \right) + c_2 \frac{\epsilon}{k} = 0 \quad (2.25)$$

Com  $c_\mu = 0,09$ ,  $c_1 = 0,126$ ,  $c_2 = 1,92$  e  $c_\epsilon = 0,07$ .

As constantes foram escolhidas de modo que o modelo reproduza com fidelidade a degradação com o tempo do fluxo turbulento homogêneo, as medidas nas camadas de cisalhamento no equilíbrio local e a lei logarítmica para paredes nas camadas limite. Vale ressaltar que este modelo não é válido próximo a paredes sólidas, portanto para modelar estas regiões pode-se assumir diversas condições de barreira. A adotada neste estudo foi uma aproximação de gradiente zero para as camadas limites das paredes para os valores de  $k$  e de  $\epsilon$ .

## 2.5 Formação de Spray

Um spray é gerado quando um líquido é injetado através um orifício com alta velocidade relativa ao seu redor. Este líquido forma um jato que subsequentemente quebra em gotículas devido as forças de arraste (atomização).

A formação de spray tem impacto em diversas áreas de estudo, desde a atomização de um pesticida em campo até a injeção de combustível dentro das condições extremas na câmara de combustão de um motor. Determinar o comportamento das gotículas após o início de um spray é tema de diversas pesquisas e modelos foram criados para tal tarefa. Dois modelos distintos de formação de spray são geralmente utilizados em CFD: a abordagem puramente Euleriana e a abordagem mista Euleriana-Lagrangiana.

A modelagem de sprays no OpenFOAM é feita pela aproximação Euleriana-Lagrangiana, onde a fase gasosa é modelada em um quadro de referência Euleriano e a fase líquida é modelada em um quadro de referência Lagrangiano. Essa aproximação gera resultados aceitáveis com menor custo computacional quando comparado a uma aproximação puramente Euleriana. Ao contrário da aproximação puramente Euleriana, que necessita de malhas mais refinadas na região adjacente ao local de injeção e timesteps menores, o modelo ELSA pode ser calculado em malhas menos refinadas. [28]. A imagem a seguir mostra um spray simulado através do modelo ELSA [9].

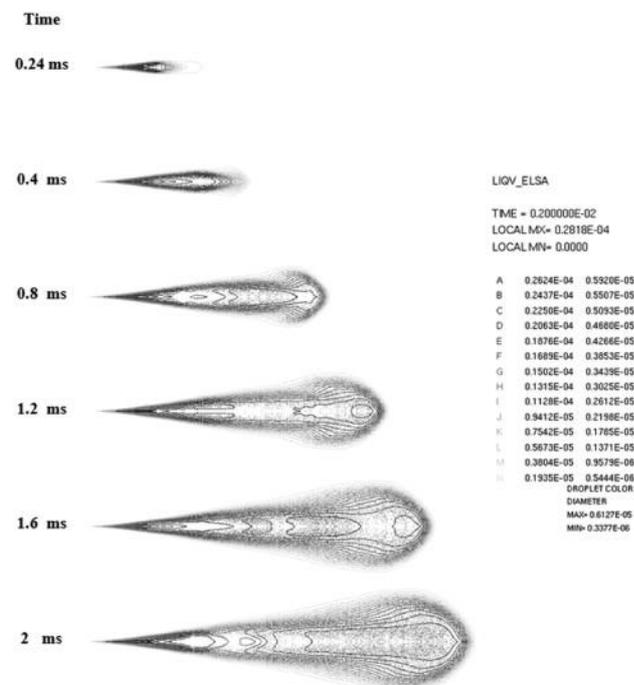


Figura 13 – Simulação Spray - ELSA [9]

Para caracterizar o modelo ELSA um conjunto de equações descritos por Vallet et al. [29] é utilizado. As equações descrevem o spray por completo, com termos podendo ser omitidos para caracterizar diferentes zonas do mesmo.

As equações foram obtidas utilizando a decomposição de Favre para todas as variáveis de fluxo, exceto pressão e densidade, que foram obtidas por decomposição de Reynolds.

A equação de transporte que descreve a velocidade média  $\tilde{u}_i$  considera uma mistura das fases gasosa e líquida, sem capilaridade e os efeitos da viscosidade são desconsiderados pelo alto número de Reynolds.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_j} \quad (2.26)$$

A não linearidade dos termos de convecção produz o termo de correlação aberto  $\widetilde{u_i'' u_j''}$ , chamado de tensor de estresse de Reynolds. Seis equações de transporte e uma equação para o termo de dissipação  $\tilde{\epsilon}$  precisam ser solucionadas para fechar a equação 2.26

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial T} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_k \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_j} = \underbrace{\bar{\rho} D_{ij}}_i + \underbrace{\bar{\rho} P_{ij}}_{ii} - \underbrace{\bar{\rho} \Omega_{ij}}_{iii} + \underbrace{\bar{\rho} \Phi_{ij}}_{iv} \quad (2.27)$$

O termo  $i$  da equação 2.27 representa o transporte por difusão. No modelo o transporte por difusão molecular é omitido já que considera-se números de Reynolds altos, então o transporte por difusão é modelado utilizando difusão por gradiente:

$$\bar{\rho} D_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\mu_t}{0,82} \frac{\partial \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_l} \right) \quad (2.28)$$

A viscosidade dinâmica turbulenta  $\mu_t$  é calculada através do modelo  $(\tilde{k}, \tilde{\epsilon})$ :

$$\mu_t = 0,09 \frac{\bar{\rho} \tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (2.29)$$

Na equação 2.28 a energia cinética turbulenta  $\tilde{k}$  é obtida através do tensor de Reynolds:

$$\tilde{k} = \frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_j''} \quad (2.30)$$

O termo  $ii$ , denominado termo de produção, é dado por:

$$\bar{\rho} P_{ij} = - \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} - \bar{\rho} \widetilde{u_j'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \quad (2.31)$$

O termo *iii* corresponde ao termo de dissipação, que representa destruição de gotículas por efeito da viscosidade molecular. Este termo é relacionado a  $\tilde{\epsilon}$  e é dado por:

$$\bar{\rho}\Omega_{ij} = \frac{2}{3}\bar{\rho}\tilde{\epsilon}\sigma_{ij} \quad (2.32)$$

A distribuição da energia cinética turbulenta criada pelas flutuações de pressão entre as coordenadas espaciais, chamada de "deformação por pressão" e dada pelo termo *iv* é exatamente:

$$\Phi_{ij} = p' \overline{\left( \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial z_i} \right)} \quad (2.33)$$

Este termo pode ser parametrizado utilizando a equação de pressão instantânea de Poisson:

$$\Phi_{ij} = \Phi_{ij,1} + \Phi_{ij,2} + \Phi_{ij,w} \quad (2.34)$$

O termo  $\Phi_{ij,1}$  representa o retorno à isotropia, também chamada de deformação lenta. O termo  $\Phi_{ij,2}$  representa a deformação rápida e, por fim, o termo  $\Phi_{ij,w}$  corresponde à interação com as paredes do domínio.

Gibson e Launder [30] definem  $\Phi_{ij,1}$  e  $\Phi_{ij,2}$  por:

$$\Phi_{ij,1} = \Phi_{ij,1} + \Phi_{ji,1} = -1, 8\bar{\rho}\tilde{\epsilon}b_{ij} \quad (2.35)$$

onde  $b_{ij}$  é dado por:

$$b_{ij} = \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{\tilde{k}} - \frac{2}{3}\delta_{ij} \quad (2.36)$$

O termo  $\Phi_{ij,2}$  é expresso por:

$$\Phi_{ij,2} = \Phi_{ij,2} + \Phi_{ji,2} = -0, 6\bar{\rho} \left( P_{ij} - \frac{2}{3}P_k \delta_{ij} \right) \quad (2.37)$$

onde  $\bar{\rho}P_{ij}$  é definida pela equação 2.31 e, por fim,  $\bar{\rho}P_k$  é definido por:

$$\bar{\rho}P_k = \frac{1}{2}\bar{\rho}P_{kk} = -\bar{\rho}\widetilde{u_k'' u_l''} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial u_l} \quad (2.38)$$

Para finalizar a definição do termo  $iv$ , define-se  $\Phi_{ij,w}$ , responsável pelo estresse perto das paredes do domínio, por:

$$\begin{aligned} \Phi_{ij,w} = 0, 5 \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \left( \widetilde{u_k'' u_m'' n_k n_m} \delta_{ij} - \frac{3}{2} \widetilde{u_k'' u_m'' n_j n_k} - \frac{3}{2} \widetilde{u_j'' u_k'' n_i n_k} \right) \frac{\tilde{k}^{\frac{3}{2}}}{C_l \tilde{\epsilon} d} \\ + 0, 3 \left( \Phi_{km,2} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \Phi_{ik,2} n_j n_k - \frac{3}{2} \Phi_{jk,2} n_i n_k \right) \frac{\tilde{k}^{\frac{3}{2}}}{C_l \tilde{\epsilon} d} \end{aligned} \quad (2.39)$$

Onde  $n_k$  é a componente  $x_k$  da unidade normal à parede,  $d$  é a distância normal e  $C_l = 0,09^{3/4}/0,4187$ . Assim, o termo  $iv$  completo é descrito por:

$$\begin{aligned} p' \left( \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right) = -1, 8 \bar{\rho} \tilde{\epsilon} \left( \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{\tilde{k}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) - 0, 6 \bar{\rho} \left( P_{ij} - \frac{2}{3} P_k \delta_{ij} \right) \\ + 0, 5 \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \left( \widetilde{u_k'' u_m'' n_k n_m} \delta_{ij} - \frac{3}{2} \widetilde{u_i'' u_m'' n_j n_k} - \frac{3}{2} \widetilde{u_j'' u_k'' n_i n_k} \right) \frac{\tilde{k}^{\frac{3}{2}}}{C_l \tilde{\epsilon} d} \\ + 0, 3 \left( \Phi_{km,2} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{3}{2} \Phi_{ik,2} n_j n_k - \frac{3}{2} \Phi_{jk,2} n_i n_k \right) \frac{\tilde{k}^{\frac{3}{2}}}{C_l \tilde{\epsilon} d} \end{aligned} \quad (2.40)$$

A modelagem da dispersão de líquido é feita através da uma equação de transporte para a fração de massa de líquido média,  $\tilde{Y}$ .

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}}{\partial x_i} = - \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u_i'' Y''}}{\partial x_i} \quad (2.41)$$

O termo  $\bar{\rho} \widetilde{u_i'' Y''}$  representa o fluxo de difusão turbulenta do líquido e é parametrizado com base em uma lei de gradiente:

$$\bar{\rho} \widetilde{u_i'' Y''} = - \frac{\mu_t}{0,7} \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_i} \quad (2.42)$$

A densidade média  $\bar{\rho}$  é dada por:

$$\bar{\rho} = \frac{\rho_g}{1 - \tilde{Y} [1 - (\rho_g/\rho_l)]} \quad (2.43)$$

A fração volumétrica de líquido média é relacionada à média de Favre da fração mássica de líquido,  $\tilde{Y}$ , por:

$$\tilde{\tau} = \frac{\bar{\rho} \tilde{Y}}{\rho_l} \quad (2.44)$$

Utilizado uma combinação das equações 2.26, 2.27, 2.41, 2.42 e 2.43 determina-se a dispersão de líquido no domínio. O diâmetro médio das gotículas, assumindo formato esférico, é calculado através da densidade média da interface gás/líquido  $\bar{\Sigma}(1/m)$ .

$$d_{32} = 2 \times r_{32} = \frac{6\bar{\rho}\tilde{Y}}{\rho_l\bar{\Sigma}} \quad (2.45)$$

Onde  $\bar{\Sigma}$  é obtido pela resolução da equação de transporte:

$$\frac{\partial\bar{\Sigma}}{\partial t} + \frac{\partial\bar{\Sigma}\tilde{u}_i}{\partial x_i} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu_t}{0,7\bar{\rho}} \frac{\partial\bar{\Sigma}}{\partial x_i} \right)}_i + \left( \underbrace{-\alpha_0 \frac{\widetilde{u}_i'' \widetilde{u}_j''}{\tilde{k}} \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}}_{ii} + \underbrace{a}_{iii} \right) \times \bar{\Sigma} \quad (2.46)$$

$$\underbrace{- \frac{1,2a\rho_l^{4/15} \sigma^{3/5} C_\mu^{3/10} (\bar{\rho}\tilde{Y})^{-13/15}}{3\tilde{\epsilon}^{2/5}} \bar{\Sigma}^{-2}}_{iv}$$

O termo  $i$  modela o termo de difusão, o termo  $ii$  representa a produção da superfície média entre faces por meio do alongamento do fluxo médio, o termo  $iii$  é obtido pela expressão:

$$a = 0,5 \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} + \frac{C_\mu^{1/2}}{(36\pi)^{2/9}} \tilde{\epsilon}^{1/3} \rho_l^{4/9} \rho^{-4/9} \tilde{Y}^{-4/9} \bar{\Sigma}^{-2/3} \quad (2.47)$$

Por fim, o termo  $iv$  é o termo de destruição que corresponde aos efeitos de coalescência, quando 2 ou mais gotículas se fundem por colisões e formam gotículas de diâmetros maiores.

## 2.6 Simulação Numérica

Simulações numéricas estão fazendo cada vez mais parte do processo científico e de projeto. A flexibilidade e alto grau de confiabilidade garantem resultados com custos menores que prototipagem ou experimentação física.

CFD (computational Fluid Dynamics) é uma das áreas que mais evoluiu nos últimos anos. Os sistemas complexos de equações diferenciais recorrentes na dinâmica de fluidos são rapidamente resolvidos por um computador. Para tal feito, o método dos volumes finitos (FVM) foi criado baseando-se nas ideias do método dos elementos finitos. Seu desenvolvimento se iniciou na década de 70 na Imperial College [31] e diversos estudos foram criados desde então.

O método dos volumes finitos é popular na área de CFD por sua discretização não precisar de transformações entre o sistema de coordenadas físicas e computacionais. Para discretizar as equações governantes, deve-se integra-las sobre os volumes em que o domínio foi subdividido e então usar uma transformação Gaussiana para transformar as integrais de volume em termos de difusão e convecção em integrais de superfície [10]. A figura 14 demonstra a conservação de uma variável escalar qualquer em um elemento volumétrico da malha usada em CFD.

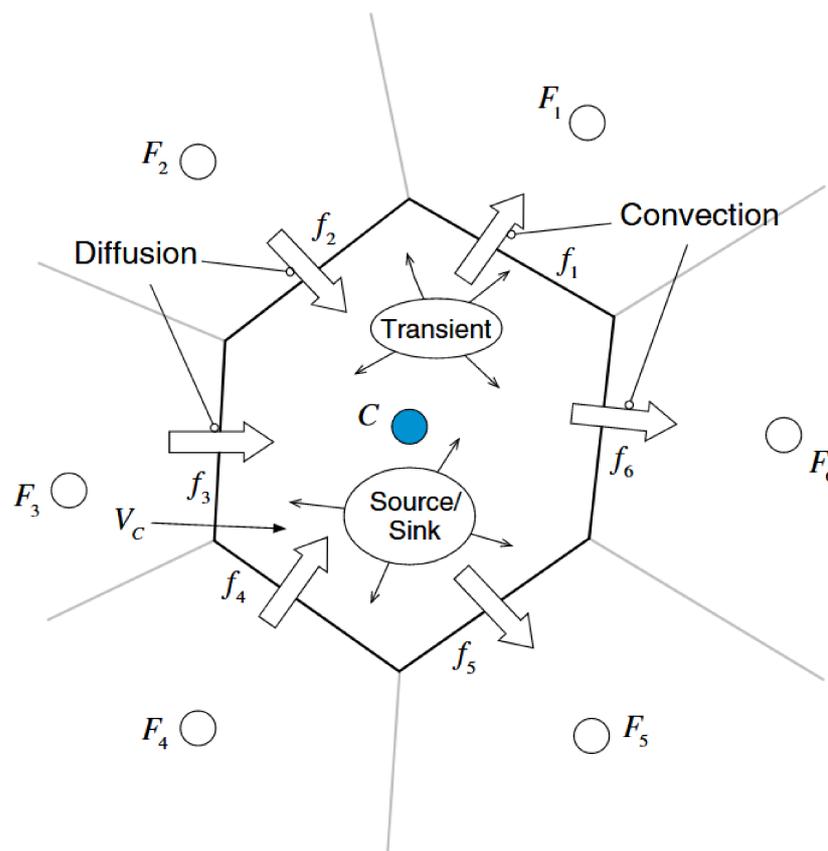


Figura 14 – Conservação em um elemento discreto [10]

A equação que governa a conservação de uma variável escalar qualquer  $\phi$  no elemento  $C$  da figura 14 pode ser expressa por:

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}}_{\text{termo transiente}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi)}_{\text{termo convectivo}} = \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi)}_{\text{termo difusivo}} + \underbrace{Q^\phi}_{\text{termo de fonte}} \quad (2.48)$$

Se o termo transiente for ignorado, obtêm-se a equação para o estado de equilíbrio:

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi) + Q^\phi \quad (2.49)$$

Integrando a equação 2.49 sobre o elemento  $C$  da figura 14 obtêm-se o seguinte:

$$\int_{V_C} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi) dV = \int_{V_C} \nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi) dV + \int_{V_C} Q^\phi dV \quad (2.50)$$

E utilizando o teorema da divergência para transformar a equação 2.50 de volume para superfície:

$$\oint_{\partial V_C} (\rho \mathbf{u} \phi) \cdot d\mathbf{S} = \oint_{\partial V_C} (\Gamma^\phi \nabla \phi) \cdot d\mathbf{S} + \int_{V_C} Q^\phi dV \quad (2.51)$$

Onde os termos em negrito são vetores,  $(\cdot)$  é o operador de multiplicação escalar,  $Q^\phi$  é o termo da fonte,  $\mathbf{S}$  o vetor de superfície,  $\mathbf{u}$  o vetor de velocidade,  $\phi$  a quantidade conservada e por fim  $\oint_{\partial V_C}$  a integral de superfície sobre o volume  $V_C$  [10].

A condição CFL (*Courant-Friedrichs-Lewy*) é extremamente importante para garantir a estabilidade de uma simulação. Em termo gerais, o número de Courant, que rege esta condição, é uma média do número de células que uma partícula atravessa em um passo de tempo. Geralmente, um número de Courant menor que 1 garante uma boa estabilidade e boa velocidade de processamento.

### 2.6.1 OpenFOAM

OpenFOAM é um software aberto de dinâmica de fluidos computacional (CFD), distribuído exclusivamente pela licença General Public Licence (GPL). A GPL dá a liberdade aos usuários de modificarem e fazerem redistribuições do software, contanto que sejam sempre gratuitas.

O precursor do OpenFOAM, o software FOAM foi criado em 1989 por Henry Weller e subsequentemente, em dezembro de 2004, foi aberto para open source sob o nome OpenFOAM pela equipe formada pelo criador Henry Weller, Chris Greenshields e Mattjis Janssens. O software está na sua oitava versão, além de um braço chamado OpenFOAM-dev, criado para testes e bug fixes [11]. A estrutura dos casos no OpenFOAM contém o conjunto mínimo de informação necessária para executar uma aplicação e está ilustrada na figura 15.

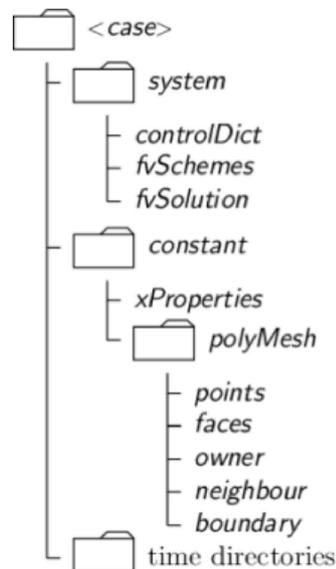


Figura 15 – Estrutura de um Caso no OpenFOAM [11]

Na pasta *constant* encontram-se os dados referentes à malha, assim como os arquivos que condicionam as propriedades térmicas, físicas e químicas referentes ao caso. Na pasta *system* contém os arquivos relacionados ao processo da solução em si. Esta pasta possui três arquivos principais: *controlDict*, que descreve os parâmetros de controle da simulação, incluindo o tempo inicial, tempo final e os parâmetros de output de arquivos; *fvSchemes* que determina os esquemas de discretização da solução e; *fvSolution* em que os algoritmos solucionadores para as equações são escolhidos, assim como a tolerância de erro.

Por fim *time directories*, contém os arquivos individuais de cada campo para um determinado tempo da simulação. Antes deve-se criar uma pasta para o tempo inicial da simulação, contendo os valores iniciais das condições de fronteira [32].

### 3 METODOLOGIA

O solver principal da simulação foi o *engineFoam*, que combina o movimento de malha associado ao movimento do pistão com a formação do spray pelo modelo ELSA. A escala de tempo da simulação é dada em função do grau do virabrequim, considerando o tempo inicial como  $-180^\circ$  antes de TC e o ângulo final  $180^\circ$  depois de TC.

Foi criada uma malha de um cilindro simples, completamente hexaédrica para a utilização no OpenFOAM. Para isto, o software aberto Salome v9.5.0 foi utilizado. O cilindro possui 200mm de diâmetro e 250mm de altura, estas dimensões foram baseadas vagamente nas dimensões do cilindro de um motor Diesel da General Electric GE-7FDL utilizado em locomotivas.

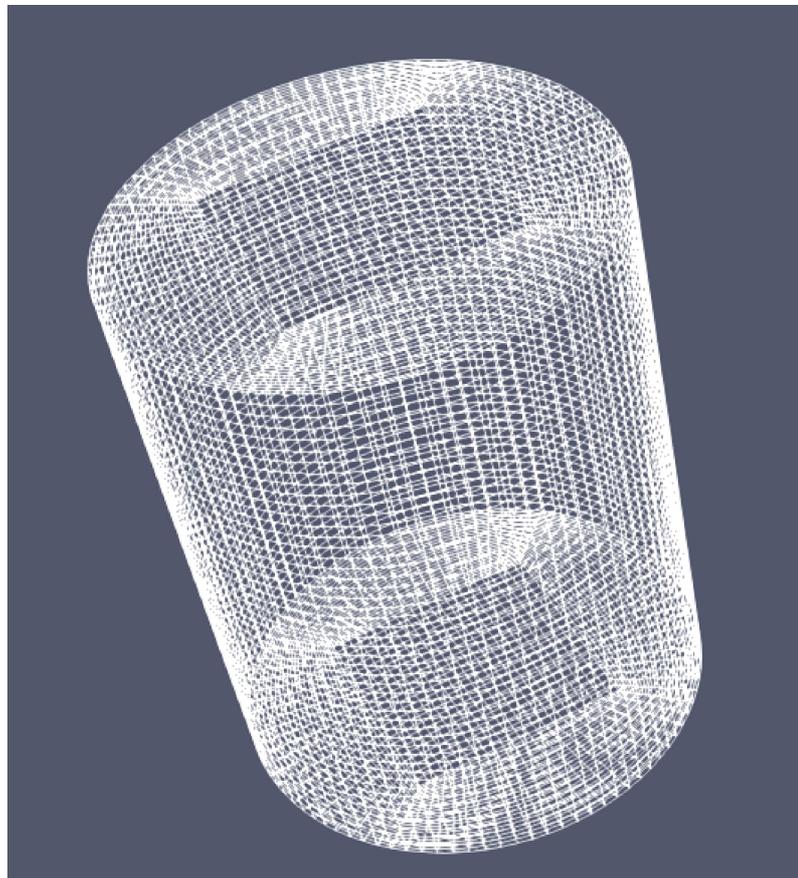


Figura 16 – Malha criada para a simulação

A figura 16 mostra a malha superficial final do volume, nota-se a uniformidade dos 10.562 elementos bidimensionais. A malha consiste de 138.240 volumes hexaédricos com a razão entre os volumes do maior e do menor elemento igual a 3,6132.

O controle das faces que realizam o movimento foi feito através de grupos de faces, dividindo a câmara de combustão em 3: a camisa do cilindro ou *liner*; o cabeçote do motor ou *cylinderHead*; e a cabeça do pistão ou *piston*. A figura 17 ilustra o grupo *cylinderHead* em azul e o grupo *liner* em vermelho. O grupo *piston* se encontra oculto pela perspectiva.

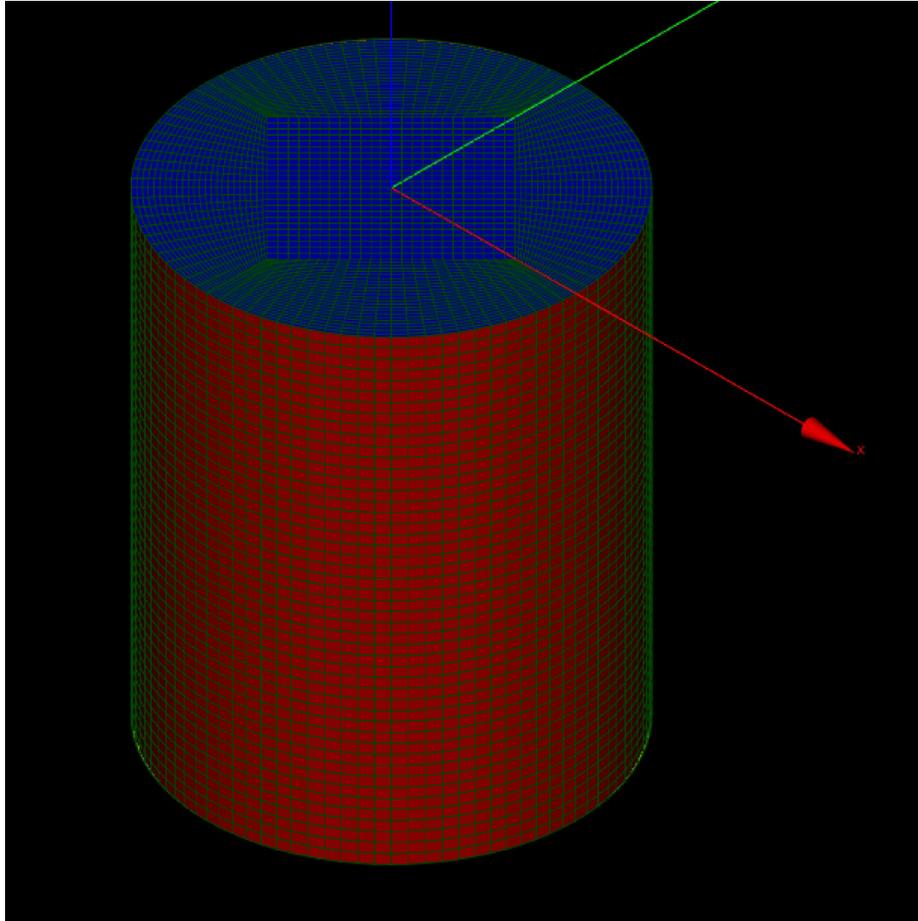


Figura 17 – Grupos de faces

A escolha da malha hexaédrica foi feita para reduzir a quantidade de faces não-ortogonais e manter o volume das células o mais perto de constante possível, evitando deformações indesejadas com o movimento da malha. Para confirmar a qualidade da malha criada, o software OpenFOAM possui a ferramenta *checkMesh*. O *checkMesh* verifica a ortogonalidade das faces, os aspectos 3D dos volumes e se há falhas ou vazios na malha superficial. A figura 18 demonstra o *output* do comando para a malha gerada inicial.

```

Overall number of cells of each type:
  hexahedra:    138240
  prisms:       0
  wedges:       0
  pyramids:     0
  tet wedges:   0
  tetrahedra:   0
  polyhedra:    0

Checking topology...
  Boundary definition OK.
  Cell to face addressing OK.
  Point usage OK.
  Upper triangular ordering OK.
  Face vertices OK.
  Number of regions: 1 (OK).

Checking patch topology for multiply connected surfaces...
  Patch      Faces    Points  Surface topology
  piston     2880    2929   ok (non-closed singly connected)
  liner      4608    4704   ok (non-closed singly connected)
  cylinderHead 2880    2929   ok (non-closed singly connected)

Checking geometry...
  Overall domain bounding box (-0.1 -0.1 -0.25) (0.1 0.1 0)
  Mesh has 3 geometric (non-empty/wedge) directions (1 1 1)
  Mesh has 3 solution (non-empty) directions (1 1 1)
  Boundary openness (1.38011e-15 4.89573e-16 -3.79248e-15) OK.
  Max cell openness = 3.29652e-16 OK.
  Max aspect ratio = 5.03063 OK.
  Minimum face area = 4.31386e-06. Maximum face area = 3.40824e-05. Face area magnitudes OK.
  Min volume = 2.2468e-08. Max volume = 8.11813e-08. Total volume = 0.00784838. Cell volumes OK.
  Mesh non-orthogonality Max: 39.1916 average: 7.43887
  Non-orthogonality check OK.
  Face pyramids OK.
  Max skewness = 2.03924 OK.
  Coupled point location match (average 0) OK.

Mesh OK.

```

Figura 18 – Output checkMesh

Uma simulação de movimento de malha, sem modelagem de turbulência, química ou de combustão, foi realizada e o processo de confirmação da malha foi repetido ao longo do processo. Com isso a qualidade foi confirmada, não havendo nenhum defeito devido ao movimento do pistão. A geometria final da câmara de combustão simulada estão descritas na tabela 4:

Característica	Unidade	Valor
Comprimento da Biela	mm	500
Diâmetro	mm	200
Comprimento Varrido	mm	236,1111
<i>Clearance</i>	mm	13,8889
Velocidade do Virabrequim	rpm	600
Razão de Compressão	-	18

Tabela 4 – Geometria do Motor

Com isso, um motor de ciclo diesel simples, com razão de compressão mediana e velocidade baixa foi modelado. A temperatura inicial dos gases no interior do cilindro era de 373K e a pressão de 1 atm.

Para o controle de passo de tempo uma aproximação de CFL foi escolhida, o algoritmo do OpenFOAM escolhe o passo para manter o número de Courant constante, no caso igual a 0,5. Para reduzir o tamanho em disco, os dados foram armazenados em um intervalo de  $1^\circ$  de ângulo de virabrequim, com um total de 360 conjunto de dados.

4 simulações foram realizadas, com razão de equivalência igual a 1, mudando apenas a proporção dos dois combustíveis presentes, o *surrogate* utilizado para o Diesel foi o n-heptano ( $n-C_7H_{16}$ ) e para o GNV foi o metano ( $CH_4$ ):

- 100% n-Heptano;
- mistura 75% de n-Heptano e 25% de metano;
- mistura 50% de n-heptano e metano;
- mistura 65% de metano e 35% de n-Heptano.

A simulação do spray utiliza como entrada a massa de combustível inserida e a simulação do interior do cilindro utiliza fração molar. A tabela 5 ilustra a composição do combustível em cada simulação.

Número da Simulação	$n-C_7H_{16}$ (g)	$CH_4$ (%)	$O_2$ (%)	$N_2$ (%)
1	0,31	0	23,4	76,6
2	0,2325	0,65	23,2244	76,136
3	0,155	1,77	22,98	75,24
4	0,1085	2,87	22,73	74,4

Tabela 5 – Composição das simulações

Foi escolhido como início da injeção um ângulo de virabrequim de  $-18^\circ$ , com duração de  $18^\circ$ . O bocal de injeção se encontrava na origem, e consistia de um orifício simples, com diâmetro de 1mm. O perfil de injeção de massa no sistema foi baseado no exemplo *aachenBomb* presente no software. A figura 19 caracteriza o perfil de injeção ao longo da duração do spray, dado em graus do virabrequim. Com os dados de duração, massa e este perfil, o solver ajusta o número de parcelas injetado a cada *timestep*, o eixo y deste perfil representa apenas uma magnitude escalar.

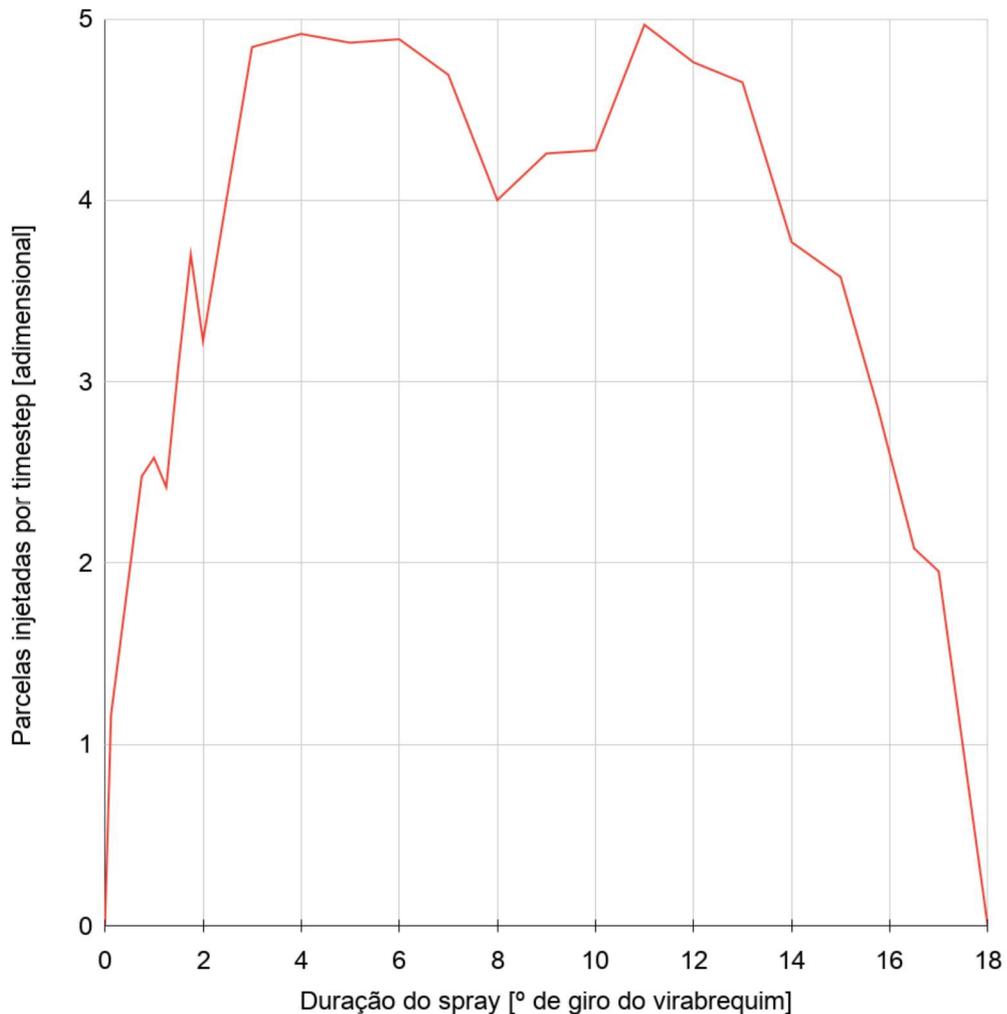


Figura 19 – Perfil da Injeção de Combustível

Para simplificar a simulação e reduzir o custo computacional, as condições de fronteiras iniciais foram selecionadas cuidadosamente. A tabela 6 detalha as condições iniciais de fronteira e no interior da malha.

Outras simplificações não presentes na tabela incluem paredes adiabáticas e a remoção do componente de radiação na troca de calor no fluido.

Variável	<i>piston</i>	<i>liner</i>	<i>cylinderHead</i>
alphaT	<i>alphanWallFunction 0</i>	<i>alphanWallFunction 0</i>	<i>alphanWallFunction 0</i>
$\epsilon$	<i>epsilonWallFunction 0</i>	<i>epsilonWallFunction 0</i>	<i>epsilonWallFunction 0</i>
$k$	<i>kqRWallFunction 1</i>	<i>kqRWallFunction 1</i>	<i>kqRWallFunction 1</i>
$N_2$	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>
nut	<i>nutkWallFunction 0</i>	<i>nutkWallFunction 0</i>	<i>nutkWallFunction 0</i>
$O_2$	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>
$P$	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>
Qdot	<i>calculated 0</i>	<i>calculated 0</i>	<i>calculated 0</i>
T	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>
U	<i>movingWallVelocity</i>	<i>noSlip</i>	<i>noSlip</i>
Ydefault	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>	<i>zeroGradient</i>

Tabela 6 – Condições Iniciais de Fronteira

Cada simulação durou cerca de 72h, com a maior parte do tempo sendo dedicado à simulação do spray de combustível, e foram realizadas em um computador pessoal, com um processador AMD Ryzen 7 2700 de oito *cores*, com *overclock* para 4,0 GHZ, 16 GB de memória RAM e um *SSD* de 240GB. Para reduzir o tempo total, as simulações foram paralelizadas entre os 8 *cores* do processador, dividindo o domínio total em 8 subdomínios cilíndricos.

Para pós-processamento o software ParaView 5.8.1 foi utilizado, um *probe* foi criado na malha das quatro simulações na mesma posição e os dados de pressão foram logados. Para a análise dos gases poluentes foi criado um corte no cilindro no último intervalo de tempo gravado e um mapa de calor representando a fração mássica local foi criado.

A comparação entre os resultados finais dos gases de exaustão foi feita qualitativamente, avaliando a escala e a distribuição do mapa de calor.

Na seção anexos encontra-se o controlDict, os esquemas de divergência e os solucionadores utilizados nas simulações.

## 4 RESULTADOS E ANÁLISES

### 4.1 Formação do Spray

A formação do spray se deu no tempo esperado, com a duração estabelecida na seção metodológica. O diâmetro médio das gotículas variou entre as simulações devido à massa introduzida no cilindro ser diferente em cada simulação. As figuras 18 a 21 ilustram a formação do spray para a condição de 100% Diesel, as esferas representam a massa de n-heptano em cada gotícula. A figura 4.1 mostra o início da injeção de combustível com o tempo do motor de  $-18^\circ$  antes de TC.

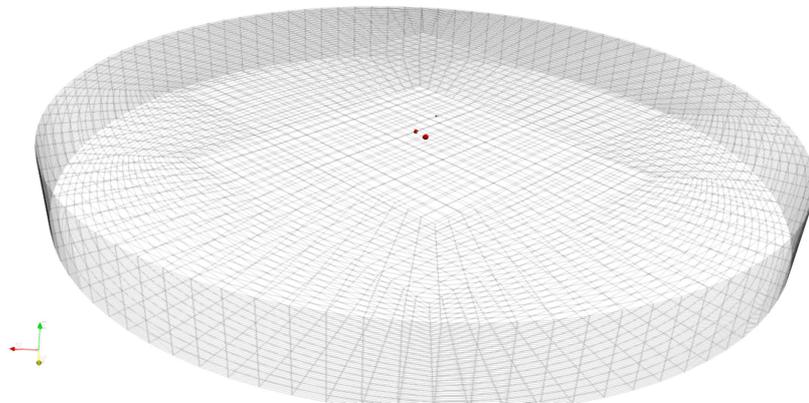


Figura 20 – Início da Injeção

As esferas na figura não estão em escala. Pode-se observar o início da atomização do spray, com pouca massa introduzida no sistema. Na figura 21 há um aumento da massa no sistema de acordo com o perfil de injeção, observa-se como as gotículas começam a se distribuir na direção radial do cilindro.

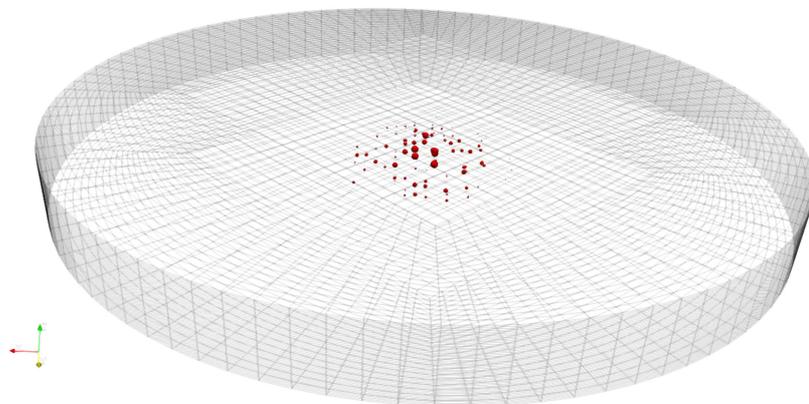


Figura 21 –  $5^\circ$  Depois do Início da Injeção

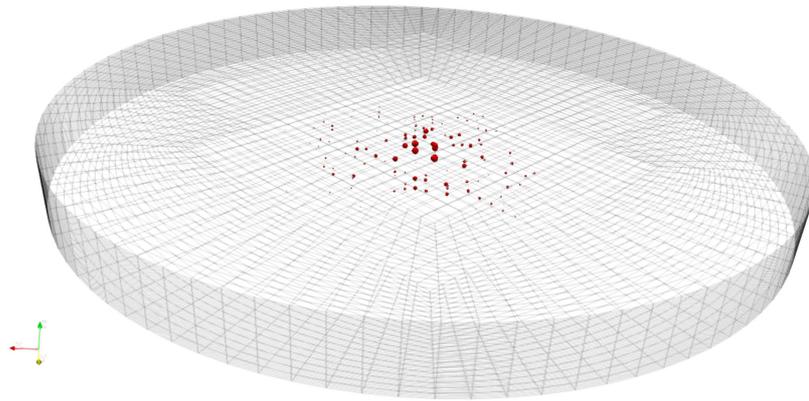


Figura 22 – 9° Depois do Início da Injeção

Nas Figuras 19 e 20, pode-se observar que a fase líquida do combustível entra em contato com o pistão, havendo deflexão das gotículas.

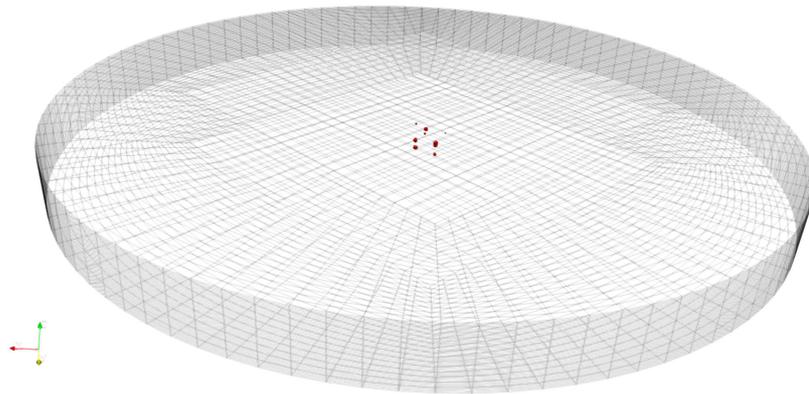


Figura 23 – 12° Depois do Início da Injeção

Após 12°, a temperatura interna no cilindro é alta suficiente para fazer com que o combustível troque de fase quase que instantaneamente como ilustrado na figura 21. A partir deste ângulo a quantidade de gotículas varia pouco.

## 4.2 Pressão Interna do Cilindro

Para determinar se o comportamento da simulação estava de acordo com o comportamento real, um gráfico comparando a pressão interna no cilindro com o ângulo do virabrequim foi feito. A figura 24 ilustra este gráfico para as diferentes simulações.

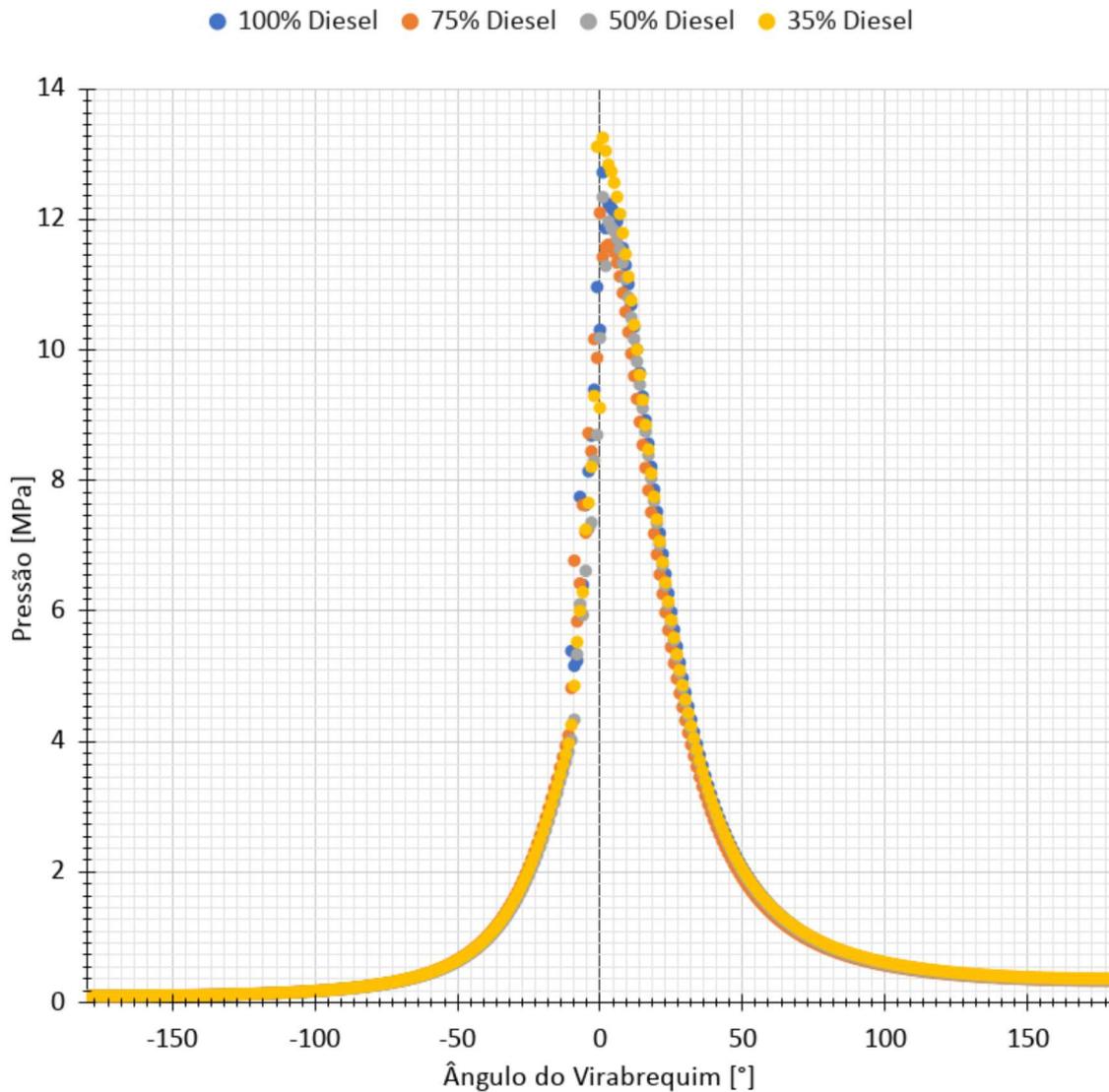


Figura 24 – Pressão x ângulo do Virabrequim

Pode-se notar que o gráfico possui comportamento semelhante ao comportamento da figura 5. Nota-se também que a pressão interna máxima ocorre em torno de 1° após TC para todas as concentrações de Diesel. A diferença média entre as curvas das diferentes concentrações foi de aproximadamente 3%. Os picos nas curvas e a diferença entre elas pode ser atribuído à flutuações locais dos campos na posição do *probe*.

### 4.3 Potência e Eficiência

Antes de calcular a potência o trabalho foi obtido através da integração dos gráficos de Pressão x Volume de cada simulação e multiplicado pela velocidade do virabrequim. Para calcular a eficiência térmica do ciclo utilizou-se a quantidade teórica de energia térmica ( $Q$ ) liberado pelo combustível.

Simulação	$Q$ [J]	$W$ [J]	Potência [kW]	$\eta$ [%]
100% Diesel	13330	8240,688	518,036	61,82
75% Diesel	12270,276	7142,938	449,071	58,23
50% Diesel	11419,597	8013,306	503,720	70,17
35% Diesel	11946,449	8161,493	513,072	68,32

Tabela 7 – Trabalho, Potência e Eficiência

Pode-se observar uma queda de eficiência térmica entre as simulações contendo 100% diesel e 75% diesel, enquanto há ganhos significativos para as simulações de 50% e 35%. Esta discrepância pode ser explicada pelo método de obtenção dos dados, onde um ponto foi escolhido para a coleta, simulando um indicador de pressão real. Com isso flutuações locais no campo de pressão tem maior influência no resultado final.

Os gráficos obtidos possuem grande proximidade com o gráfico real representado pela figura 7. A descontinuidade na região de volume máximo está relacionada ao domínio de tempo utilizado. Já que a simulação só possui escopo de compressão e expansão, a falta de movimento de válvulas para escape resulta na descontinuidade da pressão.

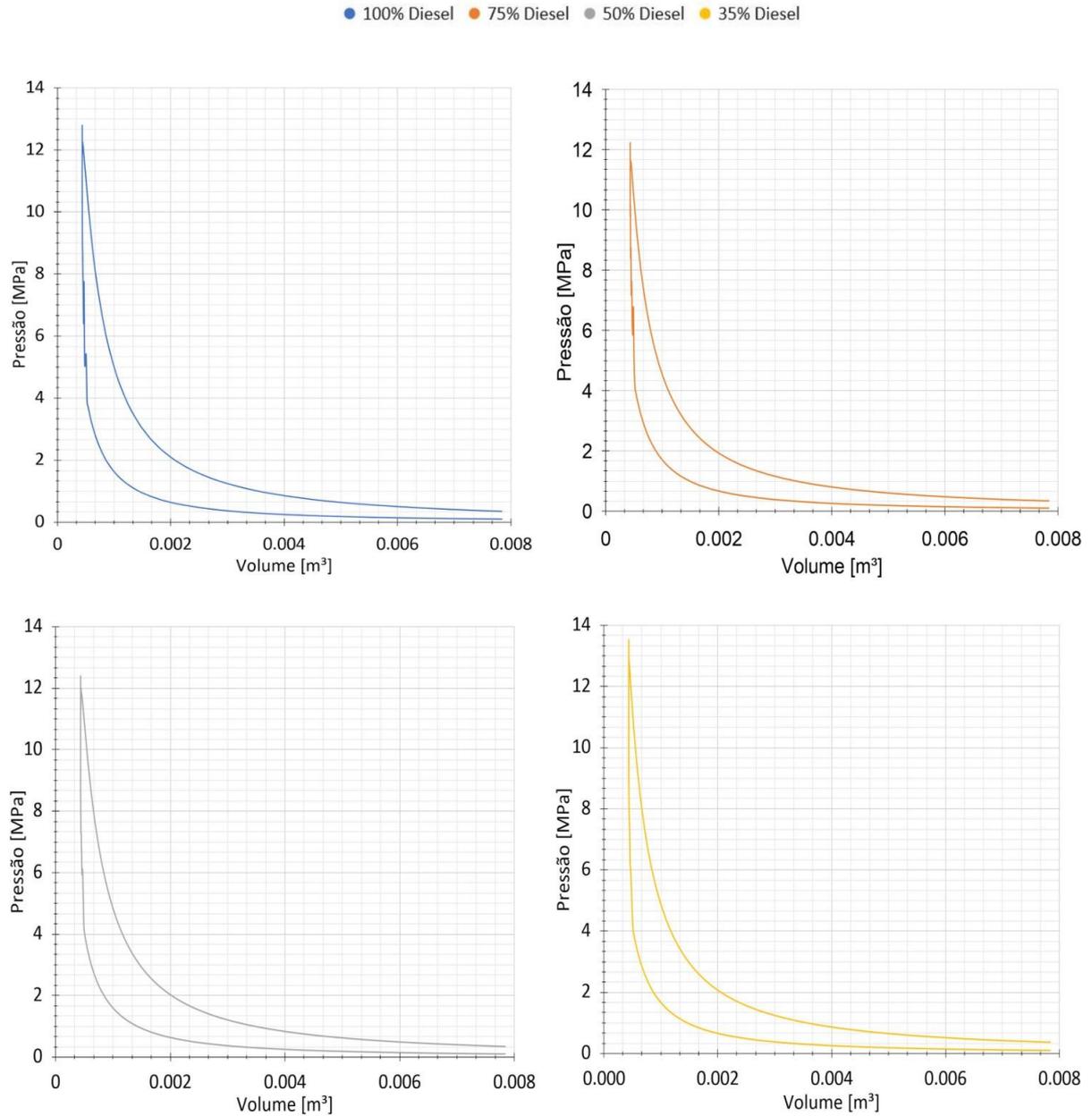


Figura 25 – Pressão x Volume

Pode-se observar que a menor pressão máxima registrada se deu para a concentração de 75% diesel, seguida pela concentração de 50% Diesel e 100% Diesel. O comportamento da curva para 35% Diesel, apesar de comparável à demais curvas obtidas e ao gráfico representado pela figura 7, possui pressão máxima maior que a simulação com 100% Diesel, contrariando o resultado esperado para uma quantidade de energia térmica disponível menor.

#### 4.4 Emissão de CO e CO<sub>2</sub>

Para 100% Diesel o mapa de calor que representa a concentração molar de CO<sub>2</sub> possui em sua escala um máximo de 15% e um mínimo de 7,8%. A figura 26 demonstra a escala para tal concentração. Pode-se observar que a maior parte do volume do cilindro possui alta concentração de CO<sub>2</sub>, excluindo a área adjacente à origem do sistema.

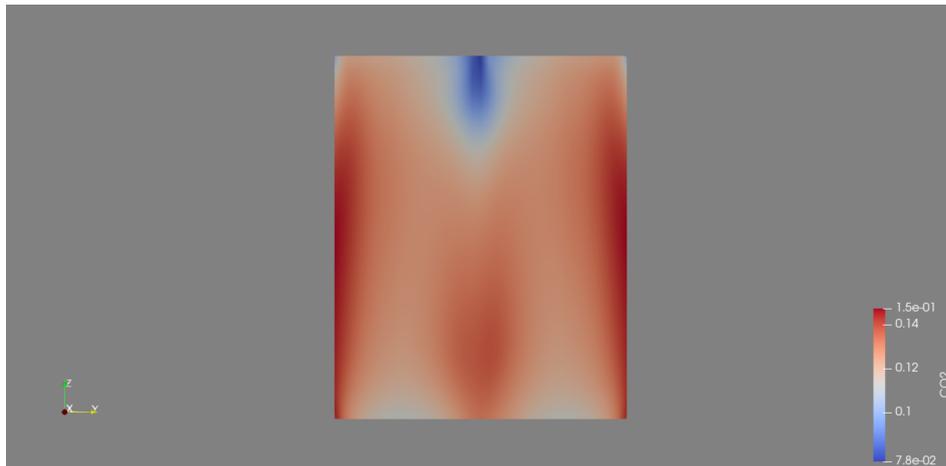


Figura 26 – Concentração molar CO<sub>2</sub> - 100% Diesel

A distribuição do CO<sub>2</sub> no interior do cilindro é relativamente homogênea, com as células nas regiões centrais possuindo concentrações próximas de 12% enquanto as regiões próximas ao grupo *liner* possuem as concentrações mais altas.

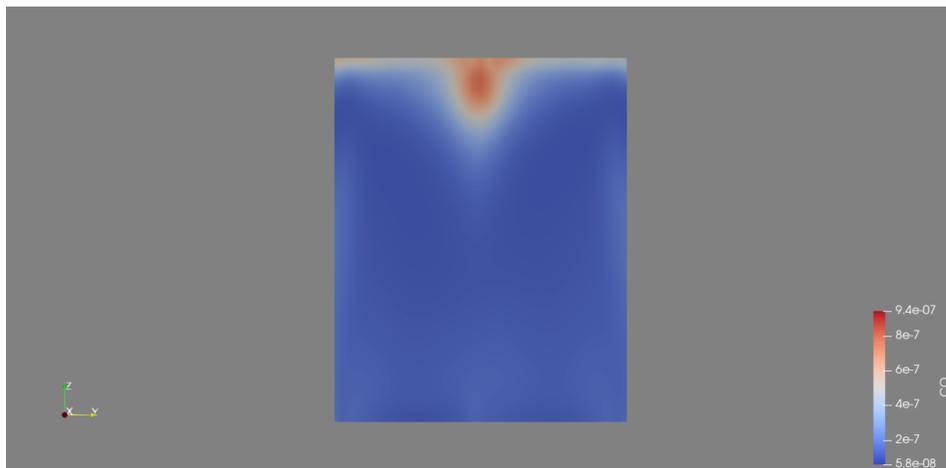


Figura 27 – Concentração molar CO - 100% Diesel

A figura 27 ilustra a concentração de CO no sistema. A concentração molar é consideravelmente menor que a concentração de CO<sub>2</sub>, o que demonstra que houve uma combustão completa. Observa-se que na região próxima à origem há a maior concentração de CO, o inverso do que ocorreu com a concentração de CO<sub>2</sub> na figura 26.

Esta distribuição indicada na figura 27 indica que na região em que há injeção de diesel a combustão não se desenvolve completamente, apontando para a difusão de combustível na região como um limitante possível para a combustão.

A figura 28 representa o mapa de calor para as concentrações molares de  $CO_2$  na simulação 2, em que o combustível é uma mistura nas proporções de 75% Diesel e 25% GNV. A concentração máxima é a mesma para a simulação com 100% Diesel, porém observa-se que o mapa de calor aponta para concentrações menores para o poluente. A região central do cilindro possui uma concentração baixa de  $CO_2$ , assim como a região próxima ao pistão, o que indica que o fluxo turbulento se desenvolveu de forma diferente da simulação 1.

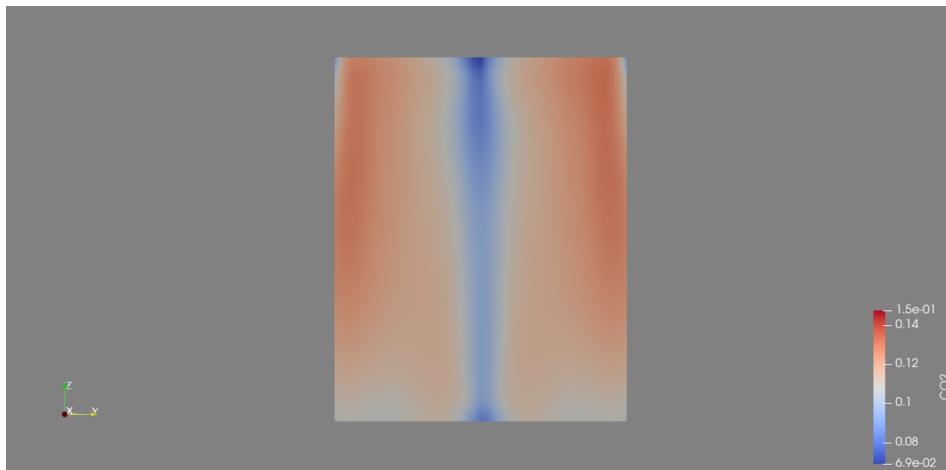


Figura 28 – Concentração molar  $CO_2$  - 75% Diesel

Comparativamente à figura 26, a queima nas regiões adjacentes ao bico injetor não se deu de forma completa, fato indicado pelas baixas concentrações de  $CO_2$  e pelas altas concentrações de  $CO$  apontadas na figura 29.

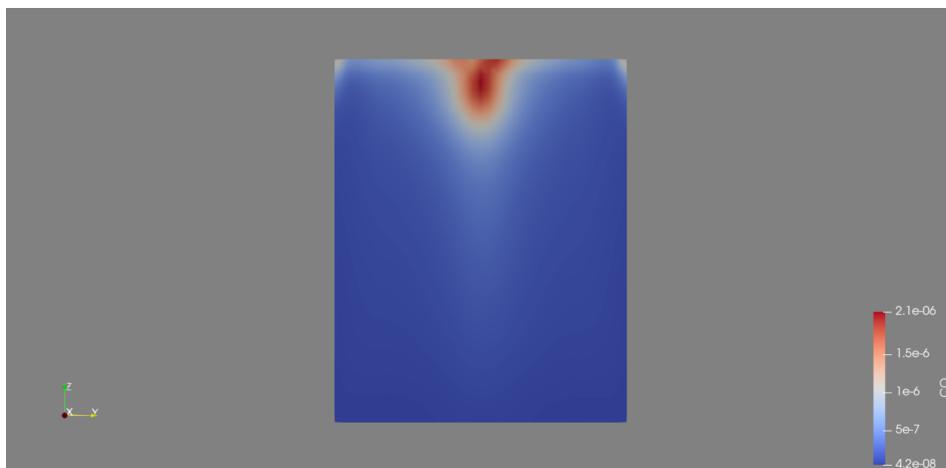


Figura 29 – Concentração molar  $CO$  - 75% Diesel

As concentrações de  $CO$  na simulação 2 foram consideravelmente mais altas que na simulação 1, com o máximo chegando a ser uma ordem de grandeza superior aos valores obtidos na simulação 1. Porém, quando comparado ao mapa da figura 28, a concentração de  $CO$  ainda é muito inferior à concentração de  $CO_2$ , indicando que a combustão, apesar de ter uma qualidade pior que a obtida na simulação 1 ainda assim foi consideravelmente completa.

Como ocorreu na simulação 1, a concentração de  $CO$  foi superior nas regiões adjacentes ao bico injetor, porém no resto do cilindro há homogeneidade. Observa-se que a distribuição dos gases foi diferente entre as simulações 1 e 2, este fato pode ser explicado pela diferença de massa injetada no cilindro e como uma massa menor afeta o spray, reduzindo o tamanho médio das gotículas e mudando o comportamento das frentes de chama.

Para a simulação 3, 50% Diesel e 50% GNV, representada na figura 30, observa-se novamente uma redução nas concentrações de  $CO_2$  quando comparado às simulações anteriores. Isso se deve ao fato de haver uma redução na quantidade de átomos de carbono disponíveis. Na região central do cilindro é onde há a menor concentração de  $CO_2$ .

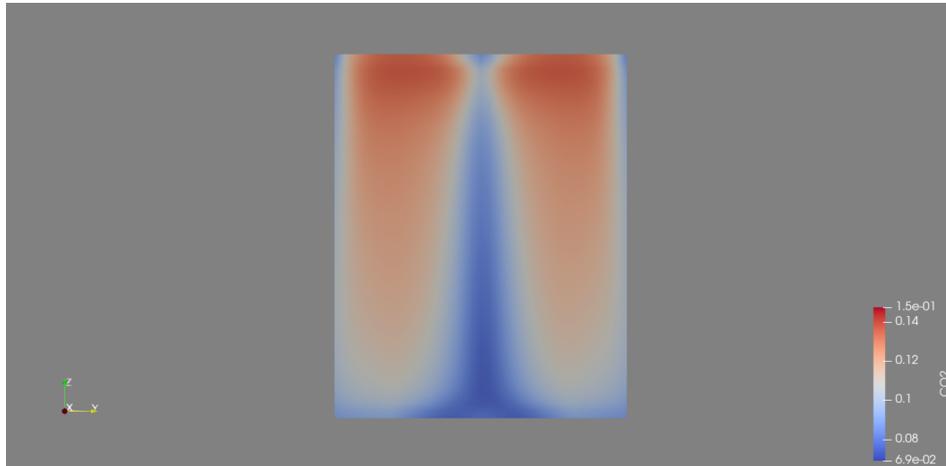


Figura 30 – Concentração molar  $CO_2$  - 50% Diesel

Quando compara-se as concentrações molares de  $CO$ , indicadas na figura 31, com as concentrações de  $CO_2$ , observa-se maior homogeneidade com as regiões próximas ao bico injetor possuindo as maiores concentrações.

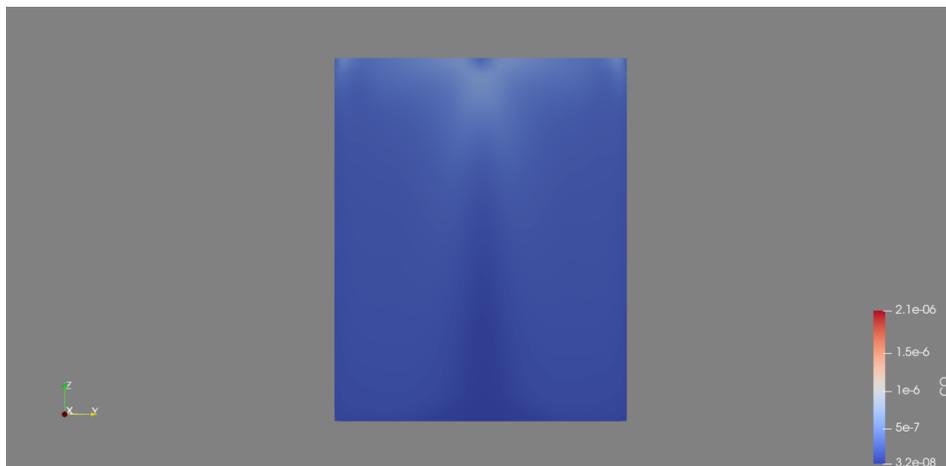


Figura 31 – Concentração molar  $CO$  - 50% Diesel

Diferentemente das simulações anteriores, em que a distribuição da concentração molar dos produtos era simétrica em relação ao eixo central do cilindro, a simulação 4 mostrou um comportamento altamente heterogêneo. Na simulação com as maiores concentrações de GNV há uma maior concentração de  $CO_2$  na parte superior esquerda do cilindro.

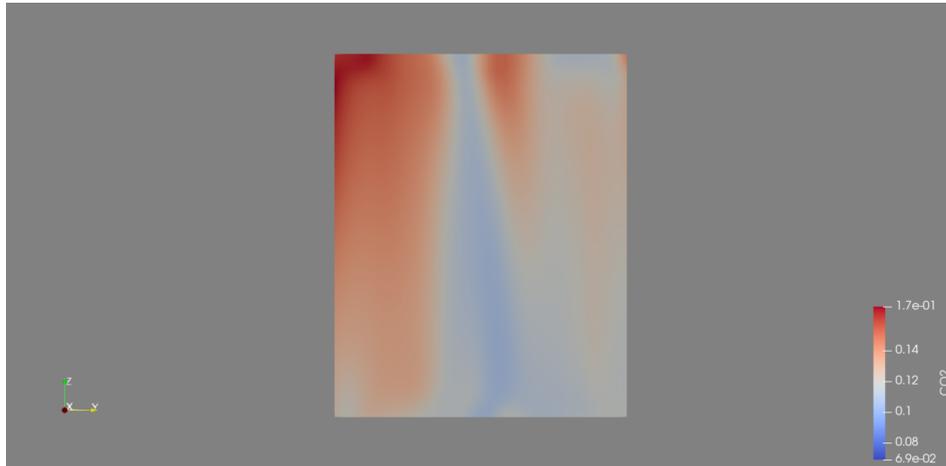


Figura 32 – Concentração molar  $CO_2$  - 35% Diesel

Pode-se observar também que a concentração média de  $CO_2$  no cilindro possui menor variação, indicando uma combustão mais completa. A figura 33 demonstra a concentração de  $CO$ , observa-se que o  $CO$  se concentra na mesma região de alta concentração de  $CO_2$  da figura 32 e que a distribuição no resto do cilindro foi homogênea.



Figura 33 – Concentração molar  $CO$  - 35% Diesel

Este comportamento pode indicar que o mecanismo escolhido não está bem definido para estas condições.

No geral, há uma redução na formação de  $CO_2$  e  $CO$  a cada simulação, fato explicado pela redução do carbono disponível conforme a concentração de GNV aumenta. Como observado, a distribuição dos produtos de combustão é diferente para cada concentração de gás natural. Isto indica que a formação do spray influencia diretamente na frente de chama, já que o número de parcelas injetadas e o tamanho médio das gotículas mudou entre simulações já que a quantidade de Diesel injetada diminuiu.

#### 4.5 Emissão de $\text{NO}_x$

O gás natural possui menos poder calorífico que o diesel, portanto há uma diminuição na temperatura da chama e conseqüentemente, na formação de óxidos de nitrogênio pelo processo térmico. A figura 34 ilustra o mapa de calor da fração molar de  $\text{NO}_2$  no interior do cilindro para a primeira simulação, em que o combustível era Diesel puro. Observa-se que as maiores concentrações estão localizadas próximas ao ponto de injeção de Diesel e próximas ao pistão.

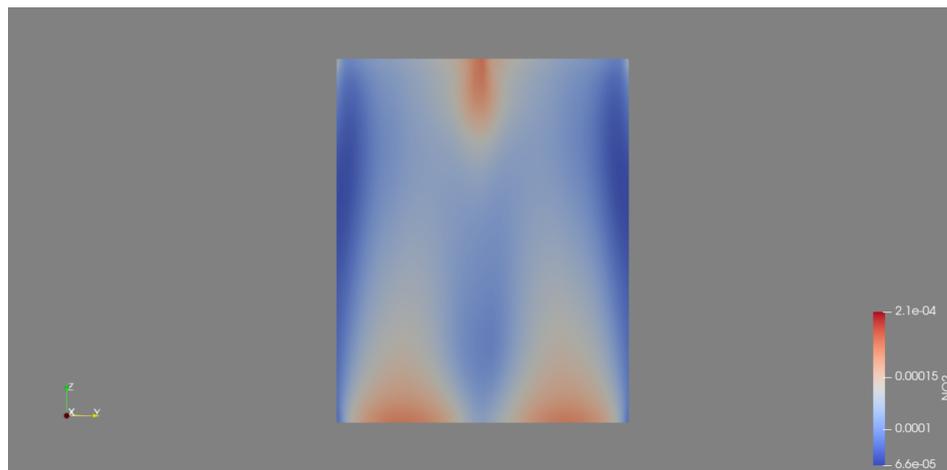


Figura 34 – Concentração molar  $\text{NO}_2$  - 100% Diesel

A distribuição não foi homogênea, com as áreas próximas ao grupo *liner* possuindo menor concentração de  $\text{NO}_2$  que no interior do cilindro. Quando comparados aos resultados obtidos na figura 35 observa-se que há maior concentração de  $\text{NO}$  no interior do cilindro, com áreas possuindo diferença de duas ordens de magnitude na concentração molar.

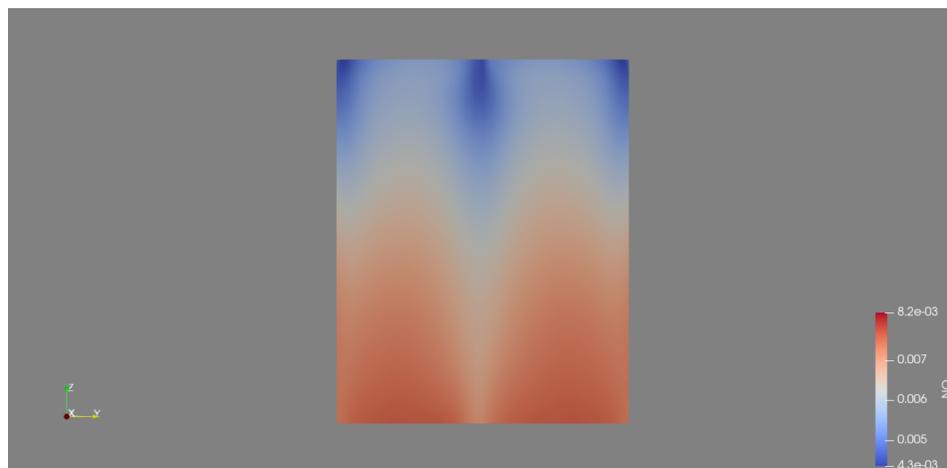


Figura 35 – Concentração molar  $\text{NO}$  - 100% Diesel

Isto mostra que não houve tempo para o mecanismo se completar ou oxigênio suficiente no sistema para terminar de oxidar o  $\text{NO}$  em  $\text{NO}_2$ .

Já na figura 36, observa-se que há uma redução para o  $NO_2$  quando a concentração de  $CH_4$  aumentou para 25%. Novamente, a área central do cilindro possui as maiores concentrações de  $NO_2$ .

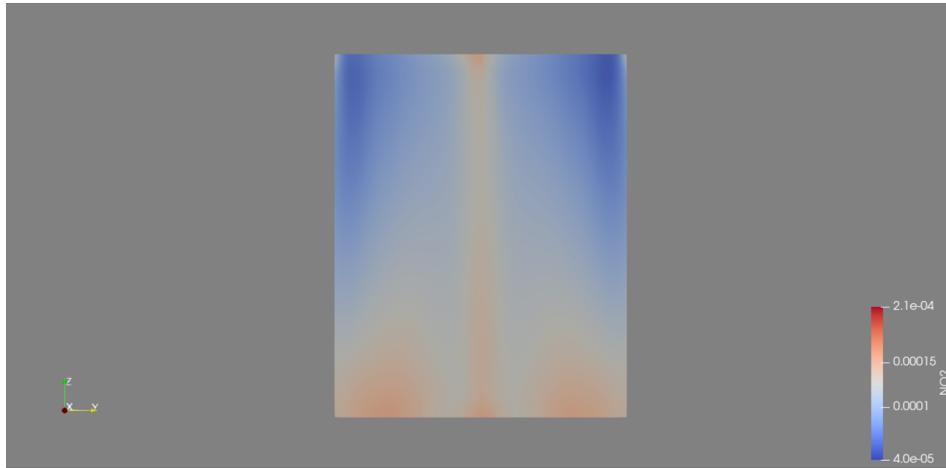


Figura 36 – Concentração molar  $NO_2$  - 75% Diesel

Quando comparada à figura 37, que ilustra a concentração molar de  $NO$ , conclui-se que o comportamento da formação do  $NO$  e  $NO_2$  foi similar ao comportamento da primeira simulação, em que as concentrações de  $NO$  foram superiores às concentrações de  $NO_2$ .

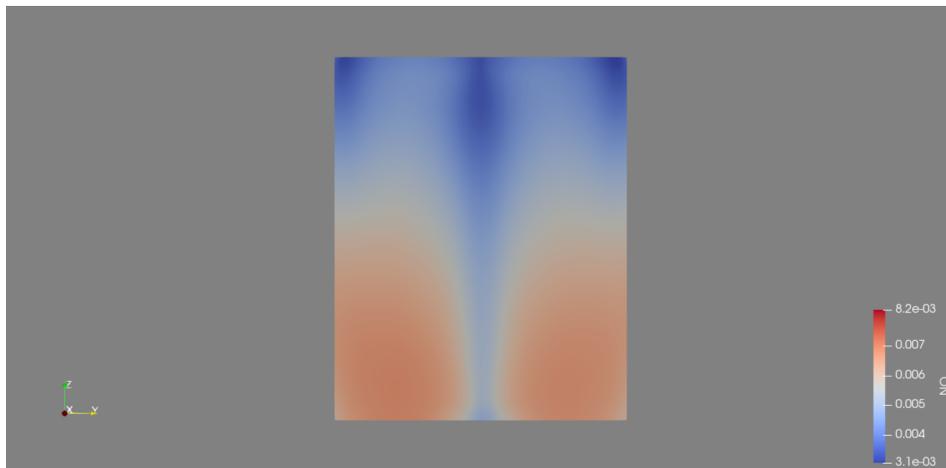


Figura 37 – Concentração molar  $NO$  - 75% Diesel

Apesar de possuir o mesmo comportamento para a formação dos gases, observa-se que a simulação 2 apresentou menor formação dos óxidos de nitrogênio. Isto se deve ao fato da temperatura interna do cilindro ser menor para esta configuração de combustível, já que a energia química disponível é menor.

As figuras 38 e 39 representam as emissões de óxidos de nitrogênio para a terceira simulação, 50% Diesel e 50% GNV, respectivamente. Novamente há uma queda da concentração de  $NO_2$ , observável no mapa de calor, agora predominantemente azul (na parte inferior da escala). Como ocorrido nas simulações anteriores, a maior concentração de  $NO_2$  se encontra próximo ao ponto de injeção e na região central do cilindro.

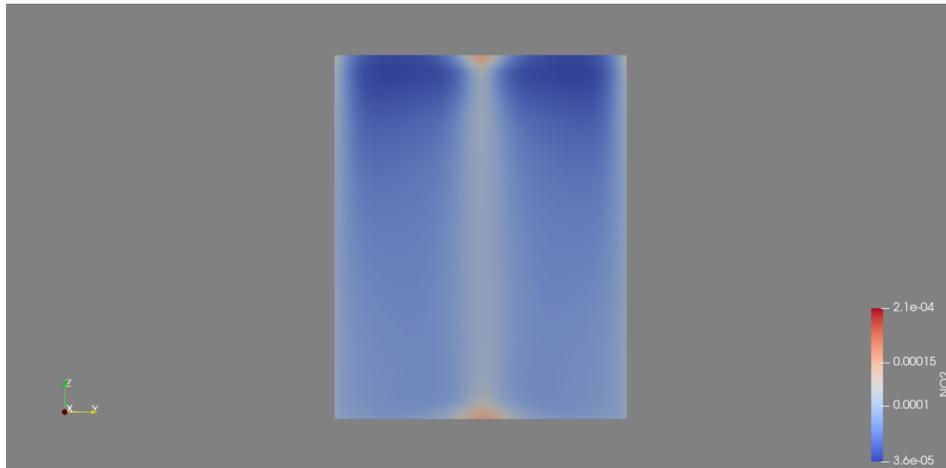


Figura 38 – Concentração molar  $NO_2$  - 50% Diesel

E como esperado, há uma maior concentração de  $NO$  no cilindro se comparado ao  $NO_2$ , porém, como ocorrido com o  $NO_2$  há uma queda na concentração geral se comparado às simulações anteriores.

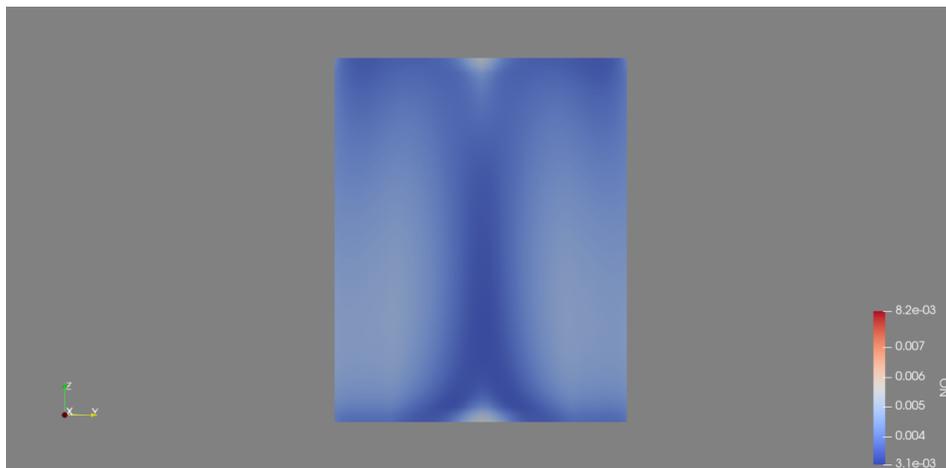


Figura 39 – Concentração molar  $NO$  - 50% Diesel

O mapa de calor indica que a maior parte do cilindro possui baixas concentrações de  $NO$ , com as áreas com maior concentração sendo a área adjacente ao ponto de injeção e o pistão, diretamente abaixo do ponto de injeção.

Por fim, as figuras 40 e 41 ilustram a concentração molar final de  $NO_2$  e  $NO$  para a última simulação. Diferentemente do que ocorreu com as outras simulações, há um aumento na concentração de  $NO_x$  quando comparado à simulação anterior. Observa-se também que a distribuição no interior do cilindro se deu de maneira assimétrica, diferentemente das outras simulações, porém condizente com o resultado obtido para  $CO_2$  e  $CO$  nesta simulação.

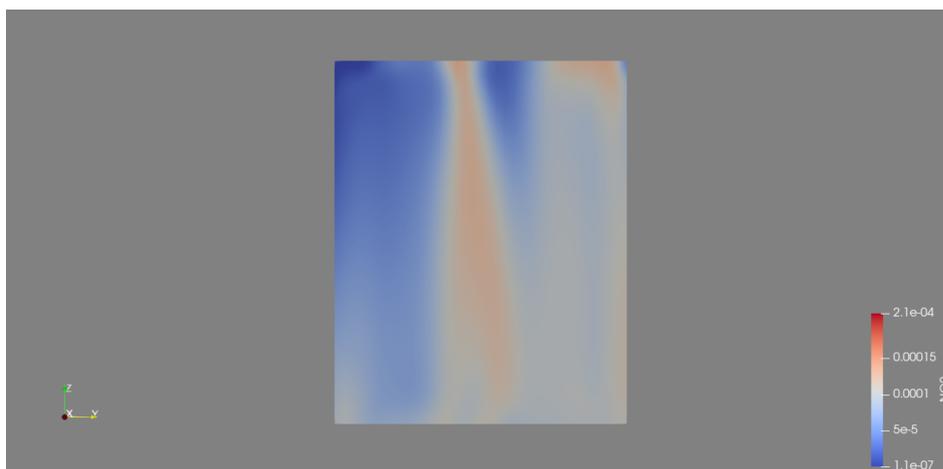


Figura 40 – Concentração molar  $NO_2$  - 35% Diesel

A concentração de  $NO$  foi a maior de todos os resultados obtidos, onde grande parte do mapa se encontra na parte superior da escala. Novamente, a concentração de  $NO$  é maior que a concentração de  $NO_2$  por duas ordens de grandeza.

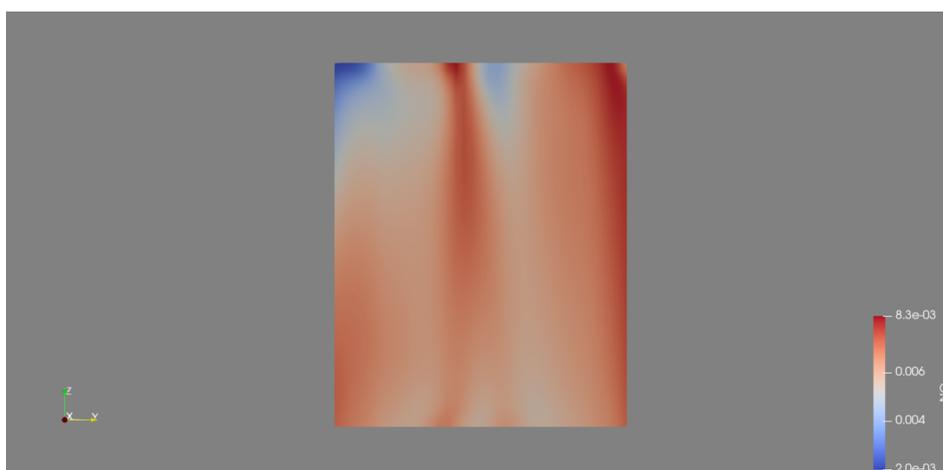


Figura 41 – Concentração molar  $NO$  - 35% Diesel

Uma possível causa para os resultados de  $NO_x$  para esta simulação é falta de granularidade do mecanismo químico simplificado que foi utilizado, que apesar de ter resolução adequada para simulações com concentrações maiores de n-Heptano (diesel), apresentou divergências quando a proporção de  $CH_4$  era elevada.

## 5 CONCLUSÕES

A formação do spray se deu como o estipulado pelas condições iniciais estabelecidas na seção metodológica. Conforme diminuiu-se a massa introduzida no sistema, o diâmetro médio da gotícula também diminuiu, já que o perfil de injeção e a duração foi o mesmo em todas as simulações. Pode-se observar que a partir de 12° de tempo de injeção, a temperatura interna do cilindro é alta o suficiente para evaporar as gotículas menores quase que instantaneamente.

O comportamento das curvas de Pressão interna do cilindro x Ângulo do virabrequim, indicadas na figura 24 foram semelhantes ao comportamento da curva indicada na figura 6 da seção revisão bibliográfica. Isto indica que a simulação é uma boa representação do fenômeno físico de combustão em um motor a combustão interna.

A diferença entre as curvas de pressão foi em média de 3%, com a simulação de uma mistura de 35% de Diesel e 65% GNV tendo o maior pico de pressão. Este pico se deu em aproximadamente 1° após TC para todas as simulações.

De acordo com a tabela 7, a potência obtida em cada simulação possui pouca variância, com exceção da simulação 2, 75% Diesel, em que a potência obtida foi 13% menor que a obtida na simulação 1, 100% Diesel. Isto se deve ao método de obtenção dos dados de pressão, que para emular um indicador de pressão real, colheu dados de um único ponto, o que tornou o método suscetível a flutuações locais no campo de pressão.

A eficiência térmica melhorou com o aumento da concentração de GNV no cilindro, já que a potência apresentou pouca variação mesmo com a diminuição da quantidade de energia térmica, com exceção da simulação 2, já que a potência caiu. A maior eficiência alcançada foi de 70,17% utilizando uma mistura de 50% Diesel e 50% GNV, mesmo considerando que não há perdas causadas por troca de calor com as paredes do sistema, é um ótimo resultado, já que a eficiência subiu aproximadamente 9% quando comparada à simulação utilizando Diesel puro.

Os gráficos de Pressão x Volume utilizados, representados na figura 25, são comparáveis ao gráfico ilustrado pela figura 7, reforçando a proximidade da simulação com o fenômeno físico.

Por fim, a emissão de gases poluentes diminuiu consideravelmente. Analisando os mapas de calor obtidos para as concentrações molares de  $CO_2$  e  $CO$ , observa-se uma queda na concentração destes gases conforme aumenta-se a concentração de GNV no sistema. Em todas as simulações a concentração de monóxido de carbono foi menor que a de  $CO_2$  e as regiões com maior concentração eram adjacentes ao ponto de injeção de diesel.

Há também redução nas emissões de  $NO_x$  conforme aumenta-se a proporção de GNV no sistema, com exceção da simulação 4, em que há um aumento quando comparado à simulação 3. Isto pode ser explicado pelo mecanismo não estar bem definido para estas condições, causando erros no cálculo da temperatura e conseqüentemente na formação dos óxidos de nitrogênio.

Há diferença no formato da distribuição dos gases poluentes para todos os mapas de calor, o que indica que a formação do spray tem ligação direta com a formação das frentes de chama e conseqüentemente da distribuição interna dos gases.

### 5.1 Sugestões para Trabalhos Futuros

O trabalho pode ser expandido com mais geometrias de câmaras de combustão, combinações de combustíveis, formas para o spray, mecanismos mais complexos, etc. Criar parcerias com empresas da cidade que operam motores diesel para comparar valores reais de simulados.

Outras linhas de investigação envolvem a incluir mais estratégias de controle de poluentes na simulação, como o gás de escape recirculado, o uso de turbo compressores e o uso de ARLA.

## REFERÊNCIAS

- [1] E.L. and W.J. Youmans. Popular science monthly, 1881.
- [2] Júlio César Chaves Câmara. Motores de combustão interna, 2003.
- [3] J. Heywood. *Internal Combustion Engine Fundamentals 2E*. McGraw-Hill Education, 2018.
- [4] Euro Diesel Admin.
- [5] F. Brunetti. *Motores de Combustão Interna - Vol. 1*. BLUCHER, 2018.
- [6] Daily Energy Insider. Wisconsin public service commission approves new minnesota power, dairyland power cooperative natural gas plant.
- [7] C.F. Taylor. *The Internal-combustion Engine in Theory and Practice: Combustion, fuels, materials, design*. Mit Press. M.I.T. Press, 1985.
- [8] Koen Schreel, Philip Goey, and D. Roekaerts. *Lecture notes of the J.M. Burgerscentrum course on combustion:19-22 April 2005, Eindhoven University of Technology, Department of Mechanical Engineering*. Eindhoven University of Technology, Department of Mechanical Engineering, 04 2005.
- [9] Sergio Hoyas, Antonio Gil, Xandra Margot, Dung Khuong, and Frederic Ravet. Evaluation of the eulerian-lagrangian spray atomization (elsa) model in spray simulations: 2d cases. *Mathematical and Computer Modelling*, 04 2013.
- [10] Fadl Moukalled, Luca Mangani, and Marwan Darwish. *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM® and Matlab®*, volume 113. 10 2015.
- [11] The OpenFOAM Foundation. Openfoam.
- [12] GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO. Resolução anp nº 50, de 23.12.2013 - dou 24.12.2013.
- [13] GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO. Resolução anp nº 16, de 17.6.2008 - dou 18.6.2008.
- [14] Naminosuke Kubota. *Thermochemistry of Combustion*, pages 23–39. 01 2007.
- [15] C.R. Ferguson and A.T. Kirkpatrick. *Internal Combustion Engines: Applied Thermosciences*. Wiley, 2015.
- [16] S.R. Turns. *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. McGraw-Hill series in mechanical engineering. McGraw-Hill, 2012.
- [17] Kazuhisa Inagaki, Takayuki Fuyuto, Kazuaki Nishikawa, Kiyomi Nakakita, and Ichiro Sakata. Dual-fuel pci combustion controlled by in-cylinder stratification of ignitability. In *SAE Technical Paper*. SAE International, 04 2006.
- [18] Rolf D. Reitz and Ganesh Duraisamy. Review of high efficiency and clean reactivity controlled compression ignition (rc-ci) combustion in internal combustion engines. *Progress in Energy and Combustion Science*, 46:12 – 71, 2015.

- [19] Gerardo Valentino, Felice E. Corcione, Stefano E. Iannuzzi, and Simone Serra. Experimental study on performance and emissions of a high speed diesel engine fuelled with n-butanol diesel blends under premixed low temperature combustion. *Fuel*, 92(1):295 – 307, 2012.
- [20] E. Lois, E.L. Keating, and A.K. Gupta. Fuels. In Robert A. Meyers, editor, *Encyclopedia of Physical Science and Technology (Third Edition)*, pages 275 – 314. Academic Pres, New York, third edition edition, 2003.
- [21] Maurice Stewart. 7 - compressor fundamentals. In Maurice Stewart, editor, *Surface Production Operations*, pages 457 – 525. Gulf Professional Publishing, Boston, 2019.
- [22] Lars Seidel, Corinna Netzer, Martin Hilbig, Fabian Mauss, Christian Klauer, Michał Pasternak, and Andrea Matrisciano. Systematic reduction of detailed chemical reaction mechanisms for engine applications. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 139(9), 04 2017. 091701.
- [23] Norbert Peters. Turbulent combustion. *Measurement Science and Technology*, 12:2022, 11 2001.
- [24] PA Niklas Nordin. *Complex chemistry modeling of diesel spray combustion*, volume 18. Chalmers University of Technology Göteborg, 2001.
- [25] J Chomiak. *Combustion A Study in theory, fact and application*. Abacus Press, 1 1990.
- [26] Salvatore Iavarone, Arthur Péquin, Zhi X. Chen, Nguyen Anh Khoa Doan, Nedunchezian Swaminathan, and Alessandro Parente. An a priori assessment of the partially stirred reactor (pasr) model for mild combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2020.
- [27] B. Mohammadi and O. Pironneau. *Analysis of the K-Epsilon Turbulence Model*. Recherches en mathématiques appliquées. Wiley, 1994.
- [28] Venkatraman Iyer and John Abraham. An evaluation of a two-fluid eulerian-liquid eulerian-gas model for diesel sprays. *Journal of Fluids Engineering*, 125(4):660–669, 08 2003.
- [29] Ariane Vallet, Alexey Burluka, and R. Borghi. Development of a eulerian model for the "atomization" of a liquid jet. *Atomization and Sprays*, 11, 11 2001.
- [30] M. Gibson and Brian Launder. Ground effects on pressure fluctuations in the atmospheric boundary layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 86:491 – 511, 06 1978.
- [31] J.C.R. Hunt. Mathematical models of turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 57:826–828, 1973.
- [32] The OpenFOAM Foundation. Openfoam v8 user guide.



```
writePrecision 6;
```

```
writeCompression off;
```

```
timeFormat      general;
```

```
timePrecision 6;
```

```
adjustTimeStep yes;
```

```
maxCo           0.5;
```

```
runTimeModifiable yes;
```

```
functions
```

```
{
```

```
    #includeFunc Qdot
```

```
}
```

```
// ***** //
```

## APÊNDICE B – FVSCHEMES

```

/*-----*- C++ -*-----*\
| ===== |
| \\ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \\ / O p e r a t i o n | Version: v2006 |
| \\ / A n d | Website: www.openfoam.com |
| \\ / M a n i p u l a t i o n | |
\*-----*/

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       fvSchemes;
}

// * * * * *

ddtSchemes
{
    default      Euler;
}

gradSchemes
{
    default      Gauss linear;
}

divSchemes
{
    default      none;

    div(phi,U)      Gauss upwind;
    div(phiid,p)    Gauss upwind;
    div(phi,K)      Gauss linear;
    div(phi,k)      Gauss upwind;
    div(phi,epsilon) Gauss upwind;
    div(meshPhi,p)  Gauss upwind;
}

```

```
div(U)          Gauss linear;
div(((rho*nuEff)*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;
div(phi,Yi_h)   Gauss upwind;
}
```

```
laplacianSchemes
```

```
{
  default      Gauss linear orthogonal;
}
```

```
interpolationSchemes
```

```
{
  default      linear;
}
```

```
snGradSchemes
```

```
{
  default      orthogonal;
}
```

```
// ***** //
```

## APÊNDICE C – FVSOLUTION

```

/*-----*- C++ -*-----*\
| ===== |
| \\ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
| \\ / O p e r a t i o n | Version: v2006 |
| \\ / A n d | Website: www.openfoam.com |
| \\ / M a n i p u l a t i o n |
\*-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       fvSolution;
}
// * * * * *

solvers
{
    rho
    {
        solver          PCG;
        preconditioner  DIC;
        tolerance       1e-05;
        relTol          0.1;
    }

    rhoFinal
    {
        $rho;
        tolerance       1e-05;
        relTol          0;
    }

    "(U|k|epsilon)"
    {
        solver          smoothSolver;
    }
}

```

```
    smoother      symGaussSeidel;
    tolerance      1e-06;
    relTol         0.1;
}
```

```
p
{
    solver         PCG;
    preconditioner DIC;
    relTol         0.1;
    smoother       GaussSeidel;
}
```

```
pFinal
{
    $p;
    tolerance      1e-06;
    relTol         0;
}
```

```
"(U|k|epsilon)Final"
{
    $U;
    tolerance      1e-06;
    relTol         0;
}
```

```
"(h|Yi|O2|N2|H2O)"
{
    solver         PBiCGStab;
    preconditioner DILU;
    tolerance      1e-6;
    relTol         0.1;
}
```

```
"(h|Yi|O2|N2|H2O)Final"
{
    $Yi;
    relTol         0;
}
```

```
    }  
}  
  
PIMPLE  
{  
    transonic        no;  
    nCorrectors      6;  
    nNonOrthogonalCorrectors 3;  
    momentumPredictor yes;  
}  
  
relaxationFactors  
{  
    equations  
    {  
        ".*Final"    1;  
    }  
}  
  
// ***** //  

```

**ANEXO A – TERMO DE AUTENTICIDADE****UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA  
FACULDADE DE ENGENHARIA****Termo de Declaração de Autenticidade de Autoria**

Declaro, sob as penas da lei e para os devidos fins, junto à Universidade Federal de Juiz de Fora, que meu Trabalho de Conclusão de Curso do Curso de Graduação em Engenharia Mecânica é original, de minha única e exclusiva autoria. E não se trata de cópia integral ou parcial de textos e trabalhos de autoria de outrem, seja em formato de papel, eletrônico, digital, áudio-visual ou qualquer outro meio.

Declaro ainda ter total conhecimento e compreensão do que é considerado plágio, não apenas a cópia integral do trabalho, mas também de parte dele, inclusive de artigos e/ou parágrafos, sem citação do autor ou de sua fonte.

Declaro, por fim, ter total conhecimento e compreensão das punições decorrentes da prática de plágio, através das sanções civis previstas na lei do direito autoral<sup>1</sup> e criminais previstas no Código Penal<sup>2</sup>, além das cominações administrativas e acadêmicas que poderão resultar em reprovação no Trabalho de Conclusão de Curso.

Juiz de Fora, 21 de Novembro de 2020.

Assinatura manuscrita em azul-escuro, sobre uma linha horizontal preta.

Jorge José Sá Filho – Discente  
Matrícula: 201271037 – CPF: 157.097.037-88

<sup>1</sup> LEI N° 9.610, DE 19 DE FEVEREIRO DE 1998. Altera, atualiza e consolida a legislação sobre direitos autorais e dá outras providências.

<sup>2</sup> Art. 184. Violar direitos de autor e os que lhe são conexos: Pena – detenção, de 3 (três) meses a 1 (um) ano, ou multa.

**ANEXO B – PROTOCOLO OPERACIONAL DE PROCEDIMENTOS  
PARA APRESENTAÇÕES DE TCC DE FORMA REMOTA**



**MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA  
PRÓ-REITORIA DE GRADUAÇÃO**

**PROTOCOLO OPERACIONAL DE PROCEDIMENTOS PARA  
APRESENTAÇÕES DE TCC DE FORMA REMOTA ANEXO**

**DECLARAÇÃO**

Eu, Jorge José Sá Filho, inscrito no CPF sob o nº 157.097.037-88, aluno do curso Engenharia Mecânica, número de matrícula 201271037, declaro estar ciente de que a apresentação de meu trabalho final de curso será realizada de forma virtual (por webconferência), conforme previsto na Resolução nº24/2020 do Conselho Superior da Universidade Federal de Juiz de Fora.

Autorizo a Coordenação do Curso a providenciar todos os trâmites necessários para a referida realização.

Por ser esta a expressão da verdade, firmo a presente.

Juiz de Fora, 26 de novembro de 2020.

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'Jorge José Sá Filho', is written over a horizontal line. Below the line, the word 'Declarante' is printed.

Declarante