

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Departamento de Engenharia Mecânica

Autor: Thiago Dale Borgatti

**CARACTERIZAÇÃO NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL DO FENÔMENO DA
DETONAÇÃO COM VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL PARA DIFERENTES TEORES
DE ETANOL NA GASOLINA EM UM MOTOR MONOCILÍNDRICO DE PESQUISA**

Belo Horizonte
Dezembro de 2017

Thiago Dale Borgatti

**CARACTERIZAÇÃO NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL DO FENÔMENO DA
DETONAÇÃO COM VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL PARA DIFERENTES TEORES
DE ETANOL NA GASOLINA EM UM MOTOR MONOCILÍNDRICO DE PESQUISA**

Dissertação apresentada ao Departamento de Engenharia Mecânica da Escola de Engenharia, como parte integrante dos requisitos para a obtenção do título de mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. José Guilherme Coelho Baeta

Belo Horizonte
Dezembro de 2017



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

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

**"CARACTERIZAÇÃO NUMÉRICA DO FENÔMENO DA DETONAÇÃO
COM VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL PARA DIFERENTES TEORES
DE ETANOL NA GASOLINA EM UM MOTOR MONOCILÍNDRICO DE
PESQUISA"**

THIAGO DALE BORGATTI

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

Dissertação aprovada no dia 07 de dezembro de 2017.

Por:



Prof. José Guilherme Coelho Baeta
Orientador - Departamento de Engenharia Mecânica/UFMG



Prof. Ramón Molina Valle
Departamento de Engenharia Mecânica/UFMG



Prof. Fabrício José Pacheco Pujatti
Departamento de Engenharia Mecânica/UFMG

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à minha família, em especial meus pais Maria Eunice e Marco Tulio que sempre me apoiaram em todas as etapas da minha vida.

À minha namorada Aline por estar sempre presente, me aconselhando e me ajudando a crescer junto com ela, pessoal e profissionalmente.

Ao Centro de Tecnologia da Mobilidade – CTM-UFMG, à equipe do Laboratório de Fluidodinâmica Computacional onde fiz muitos amigos. À equipe experimental sempre disposta a nos ajudar. Ao meu orientador Prof. Dr. José Guilherme Coelho Baeta e ao Prof. Dr. Ramon Molina Valle pela oportunidade de atuar em um grupo de pesquisa dedicado e unido que favoreceu o enriquecimento da minha trajetória acadêmica e profissional.

À Fiat Chrysler Automobiles – FCA pela oportunidade de participar do programa pioneiro no Residência Tecnológica e ao meu tutor MSc. Gustavo de Queiroz Hindi.

RESUMO

Desde o desenvolvimento dos primeiros motores de combustão interna, o fenômeno da detonação sempre foi um fator limitante ao aumento da eficiência. Sendo assim, ao longo dos anos foram desenvolvidos meios visando a solução desse problema, como a fluidodinâmica computacional. Neste trabalho foi desenvolvida uma metodologia numérica para a elaboração e validação de um modelo unidimensional de um motor monocilíndrico de pesquisa (*SCRE – Single Cylinder Research Engine*) da empresa AVL[®], presente no Centro de Tecnologia da Mobilidade – CTM-UFMG na Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG. A partir dos dados geométricos do motor e condições de contorno adquiridas em ensaios dinamométricos, fornecidas pela equipe experimental do CTM-UFMG, foi possível a elaboração de um modelo que reproduzisse os fenômenos relacionados à transferência de calor, a taxa de queima, o atrito e a eficiência volumétrica, através da plataforma *software* GT-Suite[®], com boa correlação com os dados experimentais. Sendo assim, alguns casos experimentais com condições exploradas em *MBT* e com detonação foram numericamente validados e utilizados para avaliar o modelo de detonação disponível no *software*. Após averiguar que o modelo de detonação correspondeu às expectativas, detectando o fenômeno apenas nos casos onde ela ocorreu, ele foi implementado no modelo preditivo de combustão para explorar a detonação em casos experimentais adquiridos apenas no *MBT*. Dessa maneira, o modelo preditivo de combustão se mostrou uma ferramenta eficaz na exploração numérica de condições muitas vezes difíceis de serem analisadas experimentalmente, como o fenômeno da detonação, em algumas condições limitadas à capacidade estrutural do motor.

Palavras-chave: *CFD-0/1D. Three Pressure Analysis. Detonação. Blends de combustível.*

ABSTRACT

Since the development of the first internal combustion engine, the knock phenomenon has always been a limiting factor for increasing efficiency. Therefore, along the years some alternatives to solve this problem have been developed, such as CFD (Computational Fluid Dynamics). This work presents the development of a numerical methodology for the elaboration and validation of a model that represents the Single Cylinder Research Engine - SCRE domain, of AVL® Company, in the Center of Technology Mobility - CTM-UFMG. The geometrical data from the engine, initial and boundary conditions were acquired in dynamometric tests, provided by CTM-UFMG experimental team. These data were used to build a model capable of reproducing heat transfer, burn rate, friction, and volumetric efficiency related phenomena, and this model showed a good correlation with experimental data using GT-Suite® software. Then, some experimental cases at the MBT and knock condition were reproduced and could be validated and used to evaluate the knock model sensibility available in the software. Besides the combustion and knock validation, a predictive combustion model was calibrated to numerically induce the knock in experimental cases acquired only at MBT. In this way, the predictive combustion model developed has proved to be a valuable tool capable to explore numerical conditions that are not easy to be reproduced experimentally due to the limits encountered by the structural capacity of an actual engine.

Keywords: CFD-0/1D. Three Pressure Analysis (TPA). Knock. Fuel Blends.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Figuras esquemáticas dos três tipos de injeção direta.	25
Figura 2 – Figura esquemática da representação de uma malha bidimensional em um volume de controle.....	31
Figura 3 – Figura esquemática da abordagem da malha discretizada pelo <i>software</i>	34
Figura 4 – Figura esquemática da instrumentação do motor.....	50
Figura 5 – Geometria completa do motor.....	52
Figura 6 – Volume interno do motor com planos localizados nos sensores de admissão e exaustão	52
Figura 7 – Domínio completo discretizado	53
Figura 8 – Domínio completo utilizado para os modelos de combustão prescritivo e preditivo	54
Figura 9 – Diagrama de válvulas.....	56
Figura 10 – Coeficiente de descarga da admissão.....	56
Figura 11 – Coeficiente de descarga da exaustão.....	57
Figura 12 – Resultados da otimização dos parâmetros de combustão do modelo preditivo em função do número de iterações para o E27	67
Figura 13 – Resultados da otimização dos parâmetros de combustão do modelo preditivo em função do número de iterações para o E85	67
Figura 14 – Resultados da otimização dos parâmetros de combustão do modelo preditivo em função do número de iterações para o E100	68
Figura 15 – Correlação da curva de pressão numérica e experimental do caso 1	72
Figura 16 – Correlação do gráfico LogP-LogV numérico e experimental do caso 1	72
Figura 17 – Correlação da curva de pressão numérica e experimental do caso 2	74
Figura 18 – Correlação do gráfico LogP-LogV numérico e experimental do caso 2	74
Figura 19 – Correlação da curva de pressão numérica e experimental do caso 3	75

Figura 20 – Correlação do gráfico LogP-LogV numérico e experimental do caso 3	76
Figura 21 – Correlação da curva de pressão numérica e experimental do caso 4	77
Figura 22 – Correlação do gráfico LogP-LogV numérico e experimental do caso 4	77
Figura 23 – Correlação da curva de pressão numérica e experimental do caso 5	78
Figura 24 – Correlação do gráfico LogP-LogV numérico e experimental do caso 5	79
Figura 25 – Correlação da curva de pressão numérica e experimental do caso 6	80
Figura 26 – Correlação do gráfico LogP-LogV numérico e experimental do caso 6	80
Figura 27 – Correlação das curvas de pressão numéricas dos modelos de combustão prescritivo (Wiebe), preditivo (SITurb) e experimental do caso 7...81	81
Figura 28 – Correlação dos gráficos LogP-LogV numéricos dos modelos de combustão prescritivo (Wiebe), preditivo (SITurb) e experimental do caso 7...82	82
Figura 29 – Correlação das curvas de pressão numéricas dos modelos de combustão prescritivo (Wiebe), preditivo (SITurb) e experimental do caso 8...83	83
Figura 30 – Correlação dos gráficos LogP-LogV numéricos dos modelos de combustão prescritivo (Wiebe), preditivo (SITurb) e experimental do caso 8...83	83
Figura 31 – Correlação das curvas de pressão numéricas dos modelos de combustão prescritivo (Wiebe), preditivo (SITurb) e experimental do caso 9...84	84
Figura 32 – Correlação dos gráficos LogP-LogV numéricos dos modelos de combustão prescritivo (Wiebe), preditivo (SITurb) e experimental do caso 9...85	85
Figura 33 – Comparação da pressão no cilindro sem e com detonação	88

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Dados do motor monocilíndrico de pesquisa	50
Tabela 2 – Dados dos combustíveis	51
Tabela 3 – Dados experimentais no <i>MBT</i> utilizados para a validação do modelo de combustão.	60
Tabela 4 – Dados experimentais operando com detonação induzida para a validação do modelo de detonação.	61
Tabela 5 – Dados experimentais em <i>MBT</i> utilizados na calibração do modelo de combustão preditiva e indução numérica da detonação.	62
Tabela 6 – Constantes do Cálculo da Velocidade Laminar de Chama	65
Tabela 7 – Parâmetros de calibração otimizados para o modelo preditivo de combustão	66
Tabela 8 – Diferença percentual entre os resultados numéricos e experimentais dos casos operando <i>MBT</i>	71
Tabela 9 – Diferença percentual entre os resultados numéricos e experimentais dos casos operando com detonação induzida experimentalmente.	71
Tabela 10 – Diferença percentual entre os resultados numéricos e experimentais para os casos operando com <i>MBT</i> utilizados no modelo preditivo de combustão para a indução numérica da detonação.	71
Tabela 11 – Detecção numérica da detonação induzida experimentalmente. ...	86
Tabela 12 – Extrapolação numérica da condição de detonação através do modelo preditivo.	87

LISTA DE ABREVIações E SIGLAS

ABNT – Associação Brasileira de Normas Técnicas

Ar – Átomo de Argônio

BMEP – Brake Mean Effective Pressure

C – Átomo de carbono

CAE – Computer Aided Engineering

CAD – Computer Aided Design

CFD-0/1D – One-dimensional Computacional Fluid Dynamics

CO – Monóxido de Carbono

CO₂ – Dióxido de Carbono

CTM – Centro de Tecnologia da Mobilidade

DEM – Dilution Exponent Multiplier

DI – Direct Injection

E0 – Gasolina C com 0% v/v de Etanol Hidratado

E10 – Gasolina C com 10% v/v de Etanol Hidratado

E22 – Gasolina C com 22% v/v de Etanol Hidratado

E25 – Gasolina C com 25% v/v de Etanol Hidratado

E27 – Gasolina C com 27% v/v de Etanol Hidratado

E50 – Gasolina C com 50% v/v de Etanol Hidratado

E70 – Gasolina C com 70% v/v de Etanol Hidratado

E85 – Gasolina C com 85% v/v de Etanol Hidratado

E100 – Gasolina C com 100% v/v de Etanol Hidratado

EUA – Estados Unidos da América

FCA – Fiat Chrysler Automobiles

FKGM – Flame Kernel Growth Multiplier

FMEP – Friction Mean Effective Pressure

H₂O – Água

IMEP – Indicated Mean Effective Pressure

H – Átomo de Hidrogênio

H₂ – Molécula de Hidrogênio

LEC – Laboratório de ensaio de combustíveis

MBT – Maximum Brake Torque

MBF – Mass Burned Fraction
MCI – Motores de Combustão Interna
N – Átomo de Nitrogênio
N₂ – Molécula de Nitrogênio
NBR – Norma Brasileira
NO – Monóxido de Nitrogênio
O – Átomo de Oxigênio
O₂ – Molécula de Oxigênio
OH – Hidroxila N₂ – Nitrogênio gasoso
PCI – Poder calorífico inferior
PFI – Port Fuel Injection
ProÁlcool – Programa Nacional do Álcool
RON – Research Octane Number
rpm – Rotações por minuto
S – Átomo de Enxofre
SCRE – Single Cylinder Research Engine
SO₂ – Dióxido de Enxofre
TPA – Three Pressure Analysis
TFSM – Turbulent Flame Speed Multiplier
TLSM – Taylor Length Scale Multiplier
UFMG – Universidade Federal de Minas Gerais

LISTA DE SÍMBOLOS

- \dot{m} – Vazão mássica na fronteira do volume, $\dot{m} = \rho Au$;
- m – Massa do volume;
- V – Volume;
- p – Pressão;
- ρ – Densidade;
- A – Área de seção transversal do fluxo;
- A_s – Área superficial de transferência de calor;
- e – Energia interna específica total
- H – Entalpia específica total, $H = e + \frac{p}{\rho}$;
- h – Coeficiente de transferência de calor;
- T_{fluido} – Temperatura do fluido;
- T_{parede} – Temperatura da parede;
- u – Velocidade na fronteira;
- C_f – Coeficiente de atrito;
- K_p – Coeficiente de perda de pressão;
- D – Diâmetro equivalente;
- dx – Comprimento de discretização;
- dp – Diferencial de pressão na fronteira dx ;
- dt – Diferencial de tempo;
- Δt – passo de tempo;
- Δx – mínimo comprimento de discretização espacial;
- u – velocidade do fluido;
- c – velocidade do som;
- M – multiplicador de passo de tempo especificado pelo usuário;
- V – volume de bifurcação de escoamento (m^3);
- A_{eff} – área de escoamento (m^2);
- ρ – massa específica do fluido ($\frac{kg}{m^3}$);
- h_c – coeficiente convectivo ($W/m^2 K$);
- B – diâmetro do cilindro (m);

K_1 – constante igual à 3,26;
 K_2 – constante igual à 0,53;
 p – pressão no cilindro (kPa);
 T – temperatura do cilindro (K);
 w – velocidade média do gás no cilindro dada pela Equação 7 (m/s);
 C_1 – constante igual a 6,18 nas trocas gasosas e 2,28 na compressão, combustão e expansão;
 C_2 – constante igual a 0 nas trocas e na compressão e durante a combustão e expansão é igual a 3,24E-3;
 \bar{S}_p – velocidade média do pistão (m/s);
 T_r – temperatura de trabalho do fluido antes da combustão (K);
 p – pressão instantânea do fluido (kPa);
 p_m – pressão do fluido no escoamento a frio (sem combustão) no mesmo ângulo de virabrequim que a pressão instantânea p (kPa);
 P_r – pressão do fluido de trabalho antes da combustão (kPa);
 V_d – Volume deslocado (m^3);
 V_r – Volume de trabalho do fluido antes da combustão (m^3);
 $m_{u,b}$ – massa das zonas não queimada e queimada;
 m_f – massa de combustível;
 m_a – massa de ar;
 $m_{f,i}$ – massa de combustível injetado;
 $e_{u,b}$ – energia das zonas não queimada e queimada;
 p – pressão no cilindro;
 $V_{u,b}$ – volume das zonas não queimada e queimada;
 $Q_{u,b}$ – taxa de transferência de calor das zonas não queimadas e queimadas;
 h_f – entalpia da massa de combustível;
 h_a – entalpia da massa de ar;
 $h_{f,i}$ – entalpia da massa de combustível injetado;
 x_b – fração de massa queimada;
 θ – ângulo de virabrequim;
 θ_0 – ângulo de início da combustão;
 $\Delta\theta$ – duração da combustão em graus;

m_e é a massa de ar/combustível não queimada arrastada para a superfície da frente de chama;

t é o tempo;

ρ_i e ρ_u é a densidade da massa de ar/combustível não queimada no tempo da admissão e da centelha respectivamente;

A_f é a área superficial da frente de chama para onde a massa de ar/combustível é arrastada;

S_L é a velocidade de chama laminar;

m_b é a massa queimada;

τ_b^* é o tempo característico de queima;

l_m^* é o comprimento da microescala de Taylor;

$\overline{u_i}$ é velocidade média da carga na admissão através das válvulas;

L_{iv} é levantamento de válvula na admissão;

u_T^* é velocidade turbulenta de chama;

m_1 é o multiplicador do crescimento do kernel (núcleo da chama);

m_2 é o multiplicador da velocidade turbulenta de chama;

m_3 é o multiplicador do comprimento da microescala de Taylor;

DEM é o multiplicador do efeito da diluição na velocidade laminar de chama;

B_m é a máxima velocidade laminar de chama;

B_ϕ é o valor de decaimento velocidade laminar;

ϕ é razão de equivalência no cilindro;

ϕ_m é a razão de equivalência na máxima velocidade laminar de chama;

p é pressão;

p_{ref} é 101325 Pa (pressão atmosférica de referência);

T_{ref} é a temperatura ambiente de referência, 298 K;

T_u é temperatura da mistura ar/combustível não queimado;

$Dilution$ é Fração de massa residual na zona não queimada

a é o expoente de temperatura;

β é o expoente de pressão;

$f(Dilution)$ é o efeito da diluição na velocidade laminar de chama;

t_{knock} é o instante em que ocorre a detonação;

t_{IVC} é o instante onde se inicia a simulação;

τ_k é o tempo de indução da detonação;

ON é o número de octanos do combustível;

P e T é a pressão e a temperatura da fração final da mistura ar/combustível não queimado antes de ser consumido pela frente de chama;

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	18
1.1.	MOTIVAÇÃO E RELEVÂNCIA	20
1.2.	OBJETIVOS	22
1.2.1.	<i>Objetivos Específicos</i>	22
2.	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	24
2.1.	MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA	24
2.1.1.	<i>Motores de ignição por centelha com injeção direta</i>	25
2.1.2.	<i>Motores de Ignição por centelha movidos à gasolina com diferentes percentuais de etanol</i>	27
2.1.3.	<i>Detonação em motores de combustão interna e número de octanos</i>	28
2.2.	FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL UNIDIMENSIONAL	30
2.2.1.	<i>Método numérico e equações governantes</i>	30
2.2.2.	<i>Discretização Temporal e Espacial</i>	32
2.2.3.	<i>Correlação de Woschni para a transferência de calor</i>	35
2.2.4.	<i>Modelo de combustão de duas zonas</i>	36
2.2.5.	<i>Correlação de Wiebe para fração de massa queimada</i>	38
2.2.6.	<i>Análise das curvas de pressão e cálculo da fração de massa queimada</i> ...	38
2.2.7.	<i>Modelo de combustão preditiva</i>	40
2.2.8.	<i>Modelo de detonação</i>	42
2.3.	ESTADO DA ARTE	43
3.	METODOLOGIA	49
3.1.	ESPECIFICAÇÃO DO MOTOR E AQUISIÇÃO DE DADOS EXPERIMENTAIS	49
3.2.	CRIAÇÃO DO MODELO UTILIZANDO O SOFTWARE GT-SUITE®	51
3.2.1.	<i>CAD do motor</i>	51
3.2.2.	<i>Extração do volume interno</i>	52
3.2.3.	<i>Discretização espacial do Domínio</i>	53
3.2.4.	<i>Descrição dos blocos utilizados</i>	53
3.3.	ANÁLISE DA DETONAÇÃO	59
3.3.1.	<i>Condições de operação escolhidas</i>	59
3.3.2.	<i>Modelo Não-Preditivo</i>	62
3.3.3.	<i>Calibração do modelo preditivo de combustão</i>	63

3.4.	CRITÉRIOS ADOTADOS PARA A VALIDAÇÃO DOS MODELOS DE COMBUSTÃO E	
	DETONAÇÃO EM RELAÇÃO AOS DADOS EXPERIMENTAIS	68
4.	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	70
4.1.	VALIDAÇÃO DA COMBUSTÃO	70
4.2.	ANÁLISE DA DETONAÇÃO.....	86
4.2.1.	<i>Avaliação do modelo de detonação</i>	<i>86</i>
4.2.2.	<i>Predição da condição de detonação.....</i>	<i>86</i>
5.	CONCLUSÃO	89
5.1.	SUGESTÃO DE TRABALHOS FUTUROS.....	89
	REFERÊNCIAS.....	91

1. INTRODUÇÃO

O advento da tecnologia de motores alternativos utilizando a energia liberada da oxidação de uma mistura ar/combustível para gerar energia mecânica substituiu a força de trabalho humana e animal com progressivo aumento de eficiência nos últimos 150 anos. O motor de combustão interna (MCI) desenvolvido por Nicolaus Otto e Eugen Langen em 1867, apresentava eficiência global em torno de 12%, sendo que atualmente os MCI já são capazes de atingir percentuais acima de 35% (LANZANOVA, Baeta, 2006; 2013).

Os principais fatores que contribuíram para o aumento da eficiência dos MCI foram: o desenvolvimento de estruturas e materiais de menor custo, maior resistência mecânica, menor peso, melhores propriedades térmicas, além de melhores sistemas de injeção de combustível, de ignição e a melhor qualidade do combustível. Contudo, ainda existem gargalos, como o fenômeno da detonação, que limitam parâmetros como o avanço de ignição e a razão volumétrica de compressão, os quais estão diretamente relacionados ao aumento da eficiência global dos MCI (HEYWOOD, 1988).

Muitas soluções estão sendo exploradas buscando a mitigação do fenômeno da detonação. Dentre elas pode-se citar a otimização da câmara de combustão e adoção de sistemas de injeção direta de combustível no cilindro. Além disso, as propriedades dos combustíveis utilizados nos MCI exercem grande influência no processo da combustão e no controle da detonação. As principais características que podem ser ressaltadas são a octanagem, o calor latente de vaporização e a velocidade laminar de chama. Tais propriedades estão relacionadas à resistência do combustível a sofrer a autoignição, a energia necessária para o combustível mudar de estado físico a temperatura constante e ao tempo que a frente de chama irá gastar para consumir toda a carga de ar/combustível (PULKRABEK, 2004).

Ao longo dos anos, pesquisas foram desenvolvidas com o intuito de manipular as características dos combustíveis por meio da elaboração de misturas de diferentes hidrocarbonetos e o desenvolvimento de aditivos que possibilitassem o melhor aproveitamento da energia do combustível em um MCI. Durante o período da Primeira Guerra Mundial as pesquisas foram intensificadas visando a melhoria da eficiência dos MCI para aplicação bélica. Nessa época, um aditivo antidetonante foi desenvolvido pela General Motors, o chumbo tetraetila. Pouco depois, em meados

dos anos 30, Eugene Houdry desenvolveu um processo de craqueamento térmico para a obtenção de uma gasolina de maior qualidade (maior octanagem). Tais descobertas permitiram explorar uma maior razão volumétrica de compressão, assim como maiores avanços de ignição, e conseqüentemente, maior potência e eficiência global puderam ser alcançados nos MCI (HEYWOOD, 1988).

Contudo, o aumento das emissões de poluentes veiculares, advindo do adensamento de grandes frotas nos centros urbanos, fez com que as primeiras grandes metrópoles nos EUA (Estados Unidos da América) criassem legislações para controle da poluição e aditivos, como o chumbo tetraetila, foram restringidos de serem misturados à gasolina, o que, por outro lado, dificulta os MCI a alcançarem elevadas eficiências de conversão de combustível (HEYWOOD, 1988).

Em meados dos anos 70 e 80, a crise do petróleo levou a um aumento expressivo do preço do barril. Com isso, pesquisas se intensificaram em todo o mundo na busca por combustíveis alternativos menos poluentes e que garantissem autossuficiência energética. No Brasil, foi devido ao Programa Nacional do Álcool (ProÁlcool), em 1975, que o etanol se popularizou (DE MOURA, 2014). Em 1992, o país foi pioneiro em substituir 100% do chumbo tetraetila por etanol anidro na gasolina como aditivo antidetonante (BIODIESELBR, 2006). A mistura gasolina-etanol sofreu um acréscimo gradual de até 27% em volume desse biocombustível até o ano de 2015 (BRASIL, 2015).

A concepção de um novo projeto no setor automotivo antes do desenvolvimento dos computadores modernos sempre demandou muito estudo prévio e experimentação. No entanto, a partir dos avanços tecnológicos na área da computação foi criado um ramo na engenharia denominada *CAE (Computer Aided Engineering)*, cujo significado é engenharia auxiliada por computador, a qual permitiu o planejamento e execução de novas pesquisas com significativa redução de custo e tempo, variáveis de suma importância na indústria (PULKRABEK, 2004).

A análise *CFD (Computacional Fluid Dynamics)*, ou fluidodinâmica computacional, é uma derivação da área *CAE* cujo objetivo é a análise numérica de fenômenos envolvendo escoamento, transferência de calor, atrito e reações químicas em domínios matemáticos discretizados no tempo e espaço. A linguagem desses domínios é denominada *CAD (Computer Aided Design)*, que significa desenho auxiliado por computador. A abordagem *CFD* tem ganhado cada vez mais

espaço na academia e na indústria por reproduzir os resultados experimentais com boa correlação (MALALASEKERA E VERSTEEG, 1995).

Sua aplicação na forma tridimensional, ou *CFD-3D*, ganhou destaque por se tratar de uma metodologia capaz de simular fenômenos complexos que ocorrem em motores de combustão interna, tais como: turbulência, injeção de combustível e combustão. A análise *CFD-3D*, uma vez apresentando boa correlação com dados experimentais, consiste em uma ferramenta extremamente útil na melhor compreensão dos fenômenos envolvidos, além da predição de resultados, que muitas vezes são difíceis ou impossíveis de serem obtidos experimentalmente. Todavia, dependendo do fenômeno estudado, essa abordagem, demanda alto custo de processamento computacional e tempo (MALALASEKERA E VERSTEEG, 1995).

Em virtude da demanda de resultados mais rápidos e geração de condições de contorno para os modelos multidimensionais, surgiram os modelos unidimensionais. Tais modelos, por apresentarem solução simplificada, necessitam de menor custo computacional. Sendo assim, por meio dessa análise unidimensional, é possível abranger um maior domínio de estudo (Barros, 2003).

Nesse contexto, a presente pesquisa tem por objetivo a elaboração de um modelo unidimensional que reproduza as condições de operação de um motor monocilíndrico de pesquisa (*SCRE – Single Cylinder Research Engine*), utilizando o software GT-SUITE®. Além disso, foi desenvolvida uma metodologia para a caracterização numérica da detonação através do desenvolvimento de um modelo preditivo de combustão. Através desse modelo, foi possível extrapolar e analisar condições de detonação que não foram obtidas experimentalmente devido ao risco de comprometer a integridade estrutural do motor.

1.1. Motivação e Relevância

Em Abril de 2012, um novo regime automotivo nacional foi anunciado pelo governo brasileiro. Denominado INOVAR AUTO, seu objetivo era aumentar a competitividade, tecnologia e segurança dos carros produzidos e vendidos no Brasil mediante investimento em pesquisa e desenvolvimento (P&D), inovação, engenharia local, tecnologia industrial básica, capacitação de fornecedores, produção nacional, conteúdo nacional e eficiência energética entre 2012 e 2017 (FERREIRA FILHO *et al.*, 2013).

Através do programa INOVAR AUTO, buscou-se incentivar a cooperação entre montadoras e universidades. Dentro desse conceito, surgiu o Programa de Residência Tecnológica para Engenheiros, que tem como objetivo a pesquisa e o estímulo à inovação através da parceria com estudantes bolsistas, nível mestrado, com dedicação exclusiva ao tema, para atuar junto aos profissionais de engenharia no desenvolvimento de pesquisas em temas no portfólio de projetos correntes da Fiat Chrysler Automobiles (FCA) (DE SOUZA *et al.*, 2016).

O Centro de Tecnologia da Mobilidade (CTM-UFMG) da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), dispõe de uma vasta gama de equipamentos para ensaio de MCI tanto na área experimental quanto na numérica. Dentre eles pode-se citar um motor monocilíndrico de pesquisa da empresa AVL[®] que utiliza injeção *PFI (Port Fuel Injection)*, caracterizada pela injeção no sistema de admissão, na qual a mistura ar/combustível ocorre antes de ser aspirada para dentro do cilindro, ou *DI (Direct Injection)*, na qual a injeção de combustível ocorre diretamente dentro do cilindro. Além disso, o *SCRE* possui razão volumétrica de compressão ajustável e acesso óptico que permite a filmagem do processo de combustão.

O CTM-UFMG também dispõe de um supercomputador com 216 núcleos para o processamento de simulações *CFD-3D (Computational Fluid Dynamics)* de motores de combustão interna. As simulações são capazes de reproduzir o escoamento e movimento alternativo dos motores, além de modelarem o fenômeno da combustão. Contudo, as simulações demandam muito tempo computacional, mesmo com a grande capacidade de processamento, já que envolvem fenômenos muito complexos. Sendo assim, para obter resultados rápidos, permitindo ainda a ampliação do domínio discretizado e a geração de condições de contorno para as simulações multidimensionais, usualmente é utilizada a simulação unidimensional, que apresenta resultados simplificados, com menor precisão em relação às simulações multidimensionais, mas com correlação satisfatória em relação aos dados experimentais.

A infraestrutura do CTM-UFMG resulta em um banco de dados em constante crescimento, tanto de ensaios dinamométricos, quanto de simulações computacionais. Esse banco de dados é fruto de dissertações e teses de alunos do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da UFMG, frequentemente,

elaboradas em parcerias com a iniciativa privada, acarretando em uma formação não só acadêmica, mas também profissional, prática e objetiva.

A relevância deste trabalho está na elaboração e validação com dados experimentais de dois modelos de combustão: um modelo prescritivo, que impõe a fração de massa queimada através da Função de Wiebe, e um modelo preditivo, que é calibrado em função de quatro parâmetros relacionados à combustão, além de necessitar de condições de inicialização adicionais e de dados de turbulência.

O modelo preditivo, uma vez calibrado, possui a capacidade de extrapolar resultados obtidos experimentalmente, sendo muito útil na exploração do fenômeno da detonação, já que o motor é limitado estruturalmente na exploração de condições mais extremas. O modelo de combustão prescritiva é capaz apenas de detectar a detonação, sendo então limitado às condições experimentais disponíveis.

1.2. Objetivos

O presente trabalho tem como objetivo o desenvolvimento e calibração de um modelo preditivo de detonação através de uma análise numérica unidimensional dos fenômenos relacionados à operação de um motor monocilíndrico de pesquisa utilizando a plataforma de *software* GT-SUITE[®], versão 2016, com validação experimental, focando na exploração do fenômeno da detonação.

1.2.1. Objetivos Específicos

O objetivo geral deste trabalho pode ser detalhado em objetivos específicos, como se segue:

- Elaborar o modelo unidimensional que represente o domínio do *SCRE* em estudo;
- Validar os resultados numéricos com os dados experimentais estabelecendo como tolerância máxima de 5%;
- Comparar as principais divergências entre os resultados numéricos e experimentais;
- Avaliar a sensibilidade do modelo de detonação presente no *Software* GT-SUITE[®], buscando sua validação frente aos dados experimentais com detonação induzida;

- Alcançar numericamente condições de detonação não disponíveis experimentalmente através do modelo preditivo de combustão calibrado;

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão bibliográfica desse trabalho foi dividida em três tópicos principais. No primeiro, dedicado a descrever os MCI, foram detalhados os sistemas de injeção direta de combustível em motores de ignição por centelha, assim como sua operação com etanol adicionado à gasolina em várias proporções e a descrição do processo de combustão, detonação e número de octanos. No segundo tópico foram explorados os principais conceitos da fluidodinâmica computacional unidimensional e suas equações governantes, compreendendo o método numérico utilizado, a descrição da discretização temporal e espacial, a correlação de Woschni para a transferência de calor, o modelo de combustão de duas zonas, a Função de Wiebe para imposição da fração de massa queimada e o modelo preditivo de combustão. Por último, é apresentado o estado da arte onde, no qual é realizada uma revisão sobre os principais trabalhos utilizando o *software* GT-SUITE[®], dentre dissertações, teses e artigos.

2.1. Motores de Combustão Interna

Os motores de combustão interna (MCI) podem ser definidos como motores térmicos capazes de converter a energia química do combustível em calor por meio da reação exotérmica de combustão, com objetivo de gerar potência mecânica (HEYWOOD, 1988).

Os MCI se diferem dos motores de combustão externa pelo fato da reação de oxidação do combustível com o ar ocorrer dentro do motor. A carga ar/combustível, assim como os produtos da combustão, constituem os fluidos de trabalho responsáveis por transferir a potência diretamente para os sistemas mecânicos do motor (HEYWOOD, 1988).

Além de se distinguirem quanto ao tipo de ignição, os MCI podem ainda apresentar ciclo de dois ou quatro tempos. Os motores de ignição por centelha possuem o ciclo termodinâmico semelhante ao ciclo Otto. Além disso, eram primordialmente caracterizados por operar com gasolina, utilizando sistemas de injeção indireta e razão volumétrica de compressão em torno de 9:1. Porém, atualmente estão sendo explorados novos combustíveis, como o etanol hidratado ou anidro misturado à gasolina, associando-os ainda a sistemas de injeção direta. Essa

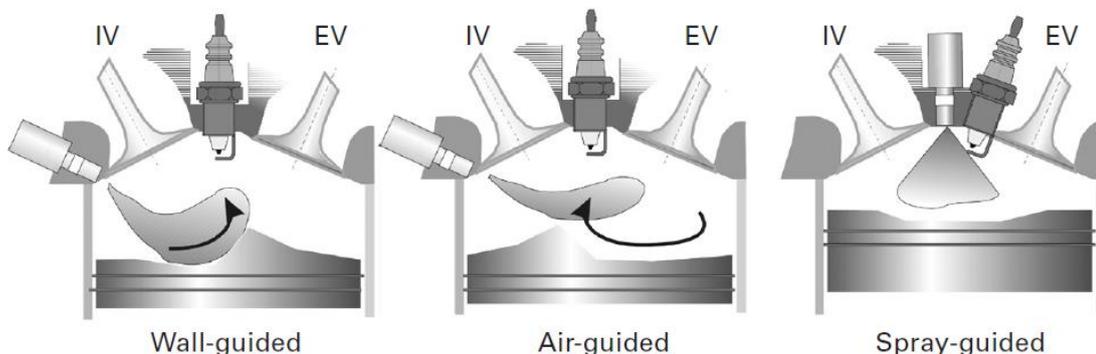
nova configuração permite a exploração de uma maior razão volumétrica de compressão e a otimização do avanço de ignição para o *MBT (Maximum Brake Torque)* em cargas mais elevadas, resultando no aumento da eficiência global do sistema sem ocorrência de detonação. Os motores de ignição por compressão operam de acordo com o ciclo Diesel, constituem motores de maior porte, com injeção de combustível direta no cilindro, e aproveitam de elevadas razões volumétricas de compressão para dar início à combustão, na qual a carga se inflama de forma espontânea (FONSECA, 2014).

2.1.1. Motores de ignição por centelha com injeção direta

A injeção de combustível nos motores de ignição por centelha pode ser do tipo *PFI (Port Fuel Injection)*, ou seja, a injeção ocorre no pórtico de admissão, ou *DI (Direct Injection)*, na qual a injeção ocorre diretamente no cilindro. A injeção direta em motores de ignição por centelha tem como objetivo tornar os motores comumente utilizados em veículos de passeio mais eficientes e competitivos em relação aos motores de ignição por compressão, pois eles são capazes de produzir mais potência específica e apresentam dispositivos de pós-tratamento mais simples e custo do sistema de injeção direta relativamente mais baixos (ZHAO, 2009).

Existem três tipos de injeção direta: *air-guided*, *wall-guided* e *spray-guided* (ZHAO, 2009), como indicado na Figura 1.

Figura 1 – Figuras esquemáticas dos três tipos de injeção direta.



Fonte: Adaptado Fischer, 2004 apud Zhao, 2009.

2.1.1.1. Wall-guided

Os sistemas de injeção direta de combustível tipo *wall-guided*, conforme ilustrado na Figura 1, direcionam a injeção para a região da vela de ignição mediante o posicionamento do injetor em função da geometria do pistão, o que favorece uma mistura rica em combustível no momento da combustão, sendo esse o motivo desse tipo de configuração ter sido a primeira a ser utilizada para a estratificação de carga. Estruturas de fluxo como *tumble* e *swirl* favorecem o direcionamento da carga, contudo, esse tipo de injeção com fluxo direto para o topo do pistão pode resultar em acúmulo de filme líquido na sua superfície e consequente aumento de emissão de hidrocarbonetos não queimados (ZHAO, 2009).

2.1.1.2. Air-Guided

A combustão via injeção de combustível no sistema *air-guided*, ao contrário do sistema *wall-guided*, visa diminuir a emissão de hidrocarbonetos evitando o contato do jato de combustível com as paredes da câmara de combustão por meio da alteração da geometria do pistão e da orientação da injeção. A turbulência no sistema *air-guided* desempenha a função de homogeneização e direcionamento da carga ar/combustível para a vela de ignição. Contudo, as estruturas de fluxo *tumble* e *swirl* requeridas tem impacto negativo na eficiência volumétrica e, conseqüentemente, no desempenho do sistema *air-guided* (ZHAO, 2009).

2.1.1.3. Spray-Guided

O sistema *spray-guided*, conforme ilustrado na Figura 1, apresenta uma configuração que favorece uma combustão mais eficiente e, conseqüentemente, menor emissão de hidrocarbonetos devido à proximidade do injetor de combustível em relação à vela de ignição. Esse tipo de injeção, diferente dos mencionados anteriormente, dispensa a necessidade de geração de estruturas de fluxo turbulento para transportar o combustível para a região próxima à vela. Sendo assim, é possível alcançar uma eficiência volumétrica maior, diminuir o trabalho de bombeamento e favorecer um desenvolvimento mais rápido da frente de chama (ZHAO, 2009).

Além disso, o sistema *spray-guided* favorece uma maior atomização do combustível e, conseqüentemente, maior evaporação e resfriamento da carga. Dessa maneira, torna-se possível explorar uma maior razão volumétrica de compressão devido ao fato de tais características tornarem o sistema menos suscetível à detonação. Tal sistema ainda acarreta em ganhos de eficiência térmica, além de uma resposta mais rápida de torque em mudanças de carga parcial para plena carga (ZHAO, 2009).

2.1.2. Motores de Ignição por centelha movidos à gasolina com diferentes percentuais de etanol

De acordo com Feitosa *et al.* (2000), pesquisas envolvendo misturas de gasolina com diferentes percentuais de etanol estão sendo intensificadas devido às características de cada combustível que, quando somadas, acarretam em ganhos de desempenho e eficiência, além de redução do nível de emissões. Atualmente o etanol é considerado uma alternativa promissora aos combustíveis fósseis. As características apresentadas por esse biocombustível, como o elevado calor latente de vaporização, alta velocidade laminar de chama, elevado número de octanos e balanço de emissão de dióxido de carbono positivo (levando em consideração o etanol produzido da cana de açúcar), favoreceram a popularização do seu uso em veículos de passeio no Brasil. Além disso, outras vantagens como:

- A produção do etanol constitui uma importante fonte de renda para trabalhadores, principalmente de áreas rurais;
- A matéria-prima para a produção do etanol é vasta, sendo assim podem ser utilizados a cana-de-açúcar, milho, beterraba, forrageiros, dentre outros;
- O etanol, por ser um biocombustível líquido, torna seu manuseio mais simples e seguro;
- O etanol pode ser utilizado puro em motores de ignição por centelha ou adicionado a outros combustíveis, como a gasolina;
- A alta octanagem do etanol possibilita a exploração de maiores razões volumétricas de compressão, possibilitando um melhor rendimento termodinâmico;

- O maior calor latente de vaporização acarreta em uma maior eficiência global, devido ao favorecimento de um menor pico de temperatura, melhor efeito de resfriamento e, conseqüentemente, menor perda de calor e menor emissão de óxido nitrogenado.

Apesar dessas vantagens existem alguns empecilhos, como a menor densidade energética, que compromete a autonomia dos veículos, maior corrosão do motor, dificuldade de partida a frio, além da emissão de aldeídos. Todavia, tais pontos negativos podem ser mitigados quando se mistura o etanol à gasolina, sendo que ele pode ainda desempenhar um papel como aditivo antidetonante, vislumbrando ainda o desenvolvimento de novos motores de ignição por centelha que apresentem uma maior razão volumétrica de compressão e a otimização do avanço de ignição sem detonação (SEIXAS, 2017).

Lira (2015), em um estudo utilizando E100, E75, E50 e E25, observou que o E100 foi o combustível que apresentou maior consumo por quilômetro em um veículo de passeio, apresentando um resultado 25,8% maior em relação ao combustível E25. O E50 apresentou um aumento de consumo 10,01% em relação ao E25. A mistura de combustível E25 foi utilizada como base de comparação por se tratar da gasolina disponível nos postos de combustíveis na época da pesquisa.

Neto (2012) e Mügge (2016), apontaram que a queima de etanol adicionado à gasolina em motores de combustão interna diminui as emissões de compostos nitrogenados, hidrocarbonetos não queimados e monóxido de carbono. Todavia, o nível de dióxido de carbono aumenta. Tais fatos podem ser explicados principalmente devido ao etanol propiciar uma combustão mais eficiente, já que apresenta um átomo de oxigênio na sua molécula. Além disso, seu alto calor latente de vaporização propicia um resfriamento da carga ar/combustível, o que resulta em uma combustão com menor temperatura máxima, o que é favorável para evitar o fenômeno indesejável da detonação.

2.1.3. Detonação em motores de combustão interna e número de octanos

A combustão em motores de ignição por centelha é considerada normal quando é iniciada pela vela em um tempo pré-definido e percorre a câmara de combustão a uma velocidade controlada. A combustão deve ser iniciada alguns graus antes do pistão alcançar o PMS (Ponto Morto Superior) no final do tempo de

compressão, pois a mesma acarreta em aumento de pressão e temperatura dentro do sistema, com o objetivo de impulsionar o pistão para o ponto motor inferior no tempo da expansão e gerar trabalho (PULKRABEK, 2004).

De acordo com Heywood (1988), a execução da ignição muito atrasada ou muito adiantada em relação ao PMS resulta em consequências negativas de operação do motor. Isso acontece pois, quando há uma combustão em que a ignição foi atrasada, o aumento de pressão e temperatura dentro do cilindro não será muito bem aproveitado no tempo de expansão, levando a perdas de trabalho no ciclo e transferência de calor excessiva na exaustão.

Todavia, se a ignição for adiantada, haverá um aumento da demanda de trabalho na compressão, devido ao prévio aumento de pressão e temperatura no sistema, trazendo como consequências o aumento de transferência de calor e atrito para esse tempo do ciclo de operação, podendo evoluir para uma combustão anormal. Sendo assim, um ponto ótimo para o instante de ignição deve ser ajustado, com a finalidade de alcançar o menor consumo e maior torque possíveis, esse instante é denominado *MBT*, do inglês *maximum brake torque* ou ainda *minimum spark advance for the best torque* (BAETA, 2006).

A combustão é considerada anormal quando é iniciada fora do instante pré-determinado pela centelha, como em pontos quentes na câmara de combustão capazes de iniciar a inflamação da mistura ar/combustível ou em condições em que a pressão e temperatura são altas o suficiente para mistura ar/combustível alcançar a condição de autoignição. No processo da combustão a expansão dos gases queimados atrás da frente de chama provoca um aumento da pressão e temperatura na região da mistura ar/combustível não queimada. Esse efeito pode acarretar na queima espontânea, ou autoignição da carga ainda não consumida pela frente de chama, caso a queima não seja rápida o suficiente. O efeito da autoignição pode se agravar através do aparecimento de ondas de choque, em decorrência das reações em cadeia da combustão fora de controle, o que pode ocasionar sérios danos ao motor. Esse fenômeno de detonação é popularmente conhecido como "batida de pino" ou, em inglês, *knock* (PULKRABEK, 2004).

A definição de octanagem está relacionada ao desempenho antidetonante de um determinado combustível ou ainda na resistência do combustível em sofrer autoignição quando submetido a condições severas de temperatura e pressão nos

motores de combustão interna. A octanagem pode ser medida através de uma escala calibrada entre o n-heptano e o iso-octano, na qual o n-heptano é o fator mínimo da escala, que é 0, e o iso-octano é o fator máximo, que é 100. Contudo, combustíveis como o etanol possuem uma característica antidetonante superior ao iso-octano, sendo assim, extrapolam o valor máximo da escala (CHAVES, 2013).

2.2. Fluidodinâmica Computacional Unidimensional

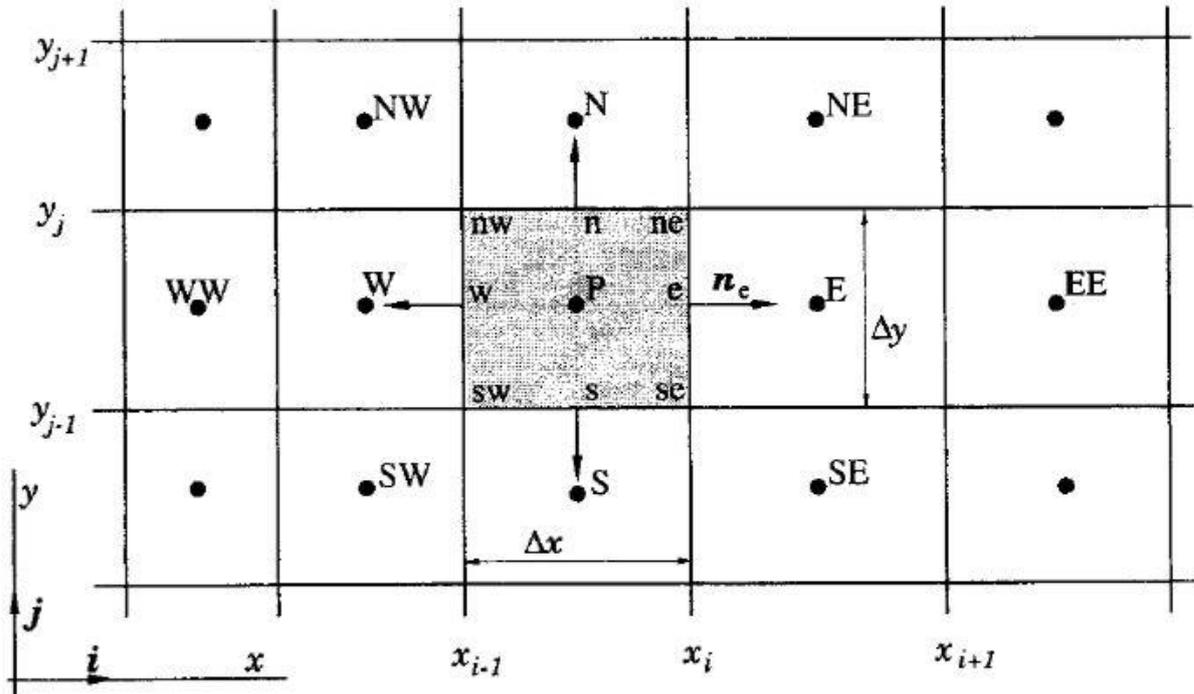
A aplicação da fluidodinâmica computacional (*CFD*) tem ganhado cada vez mais espaço tanto na academia quanto na indústria por agregar ganhos em tempo e dinheiro, se comparado aos experimentos (MALALASEKERA E VERSTEEG, 1995).

A modelagem numérica unidimensional dos motores de combustão interna tem sido bastante abordada no estudo dos fenômenos da combustão, eficiência volumétrica, trocas gasosas, transferência de calor e atrito. *Software* comerciais como o GT-SUITE[®], que abrange uma gama de ferramentas desde a edição de arquivos *CAD*, discretização espacial e temporal, simulação numérica até o pós-processamento dos dados, têm sido cada vez mais utilizados para obtenção de resultados rápidos com boa correlação experimental, permitindo ainda a geração de condições de contorno para modelos mais complexos como os *CFD-3D* (LANZANOVA, 2013).

2.2.1. Método numérico e equações governantes

Conforme o GT-SUITE[®] *Flow Theory Manual* (2015b), o software resolve o escoamento através da integração das equações de momentum, conservação da massa e energia no eixo *x*, em volumes de controle discretizados no espaço e tempo. O método numérico utilizado é denominado volumes finitos, no qual as variáveis são calculadas no centro do volume de controle e a interpolação para a fronteira resulta em um escalar médio, conforme ilustrado na Figura 2.

Figura 2 – Figura esquemática da representação de uma malha bidimensional em um volume de controle



Fonte: Adaptado de Lanzanova (2013).

As Equações 1, 2 e 3 são, respectivamente, as equações de conservação da massa, energia e quantidade de movimento.

$$\frac{dm}{dt} = \sum \dot{m} \quad (1)$$

$$\frac{d(me)}{dt} = -p \frac{dV}{dt} + \sum (\dot{m}H) - hA_s (T_{fluido} - T_{parede}) \quad (2)$$

$$\frac{d\dot{m}}{dt} = \frac{dpA + \sum(\dot{m}u) - 4C_f \frac{\rho u |u|}{2} \frac{dxA}{D} - K_p \left(\frac{1}{2} \rho u |u|\right) A}{dx} \quad (3)$$

Sendo que:

- \dot{m} Vazão mássica na fronteira do volume, $m = \rho Au$;
- m Massa do volume;
- V Volume;
- p Pressão;
- ρ Densidade;
- A Área de seção transversal do fluxo;

A_s	Área superficial de transferência de calor;
e	Energia interna específica total
H	Entalpia específica total, $H = e + \frac{p}{\rho}$;
h	Coefficiente de transferência de calor;
T_{fluido}	Temperatura do fluido;
T_{parede}	Temperatura da parede;
u	Velocidade na fronteira;
C_f	Coefficiente de atrito;
K_p	Coefficiente de perda de pressão;
D	Diâmetro equivalente;
dx	Comprimento de discretização;
dp	Diferencial de pressão na fronteira dx ;
dt	Diferencial de tempo;

A formulação apresentada pelas Equações 1, 2 e 3 se baseiam no equacionamento unidimensional utilizado pelo *Software GT-SUITE®*, no qual a Equação 1 representa a conservação da massa em um volume de controle e é igual ao somatório das vazões mássicas de entrada e saída do domínio. A Equação 2 descreve a conservação da energia e pode ser definida como a taxa da variação de energia, sendo igual à soma de seus componentes associados ao trabalho e ao calor no volume de controle. Por último, a equação da conservação da quantidade de movimento, que pode ser definida como o somatório das quantidades de movimento que entram e saem, e as forças de cisalhamento e pressão líquida atuando na superfície do volume de controle, conforme pode ser observado na Equação 3.

2.2.2. Discretização Temporal e Espacial

A solução do escoamento realizada através da integração das Equações de conservação 1, 2 e 3 em sub-volumes discretizados, de acordo com o *GT-SUITE® Flow Theory Manual (2015b)*, pode ser efetuada através de três formas: pelo método implícito, explícito ou quase estático. O método escolhido para esse trabalho foi o explícito devido ao mesmo proporcionar melhores resultados para sistemas nos

quais os fenômenos relacionados à pulsação de ondas de pressão são importantes, como o modelamento de sistemas de admissão, de exaustão e do cilindro em motores de combustão interna.

A relação entre o passo de tempo e o comprimento de discretização é determinada pelo Número de Courant. A solução do método realiza um cálculo direto, sem a necessidade de iterações e alcança uma condição em regime permanente, escolhendo um passo de tempo que satisfaça as condições de Courant, de acordo com a Equação 4.

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} (|u| + c) \leq 0,8 * m \quad (4)$$

Onde:

Δt é passo de tempo;

Δx é o mínimo comprimento de discretização espacial;

u é a velocidade do fluido;

c é a velocidade do som;

0,8 é o número de courant adotado pelo *software*;

m é o multiplicador de passo de tempo especificado pelo usuário;

Na Equação 4, o tempo computacional de processamento está diretamente relacionado ao menor comprimento de discretização espacial Δx e o passo de tempo Δt .

O cálculo do passo de tempo Δt para a bifurcação de escoamento descrita na Equação 5, segue uma metodologia similar à utilizada para a condição de courant apresentada pela Equação 4 para dutos simples:

$$\Delta t \propto \frac{\rho V}{\rho A_{\text{eff}} c} \quad (5)$$

Na qual:

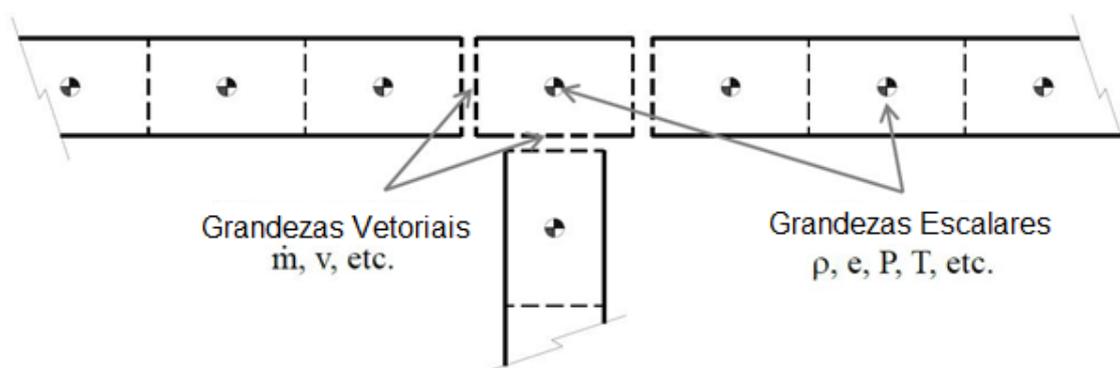
V é o volume de bifurcação de escoamento (m^3);

A_{eff} é a área de escoamento (m^2);

ρ é a massa específica do fluido ($\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$);

A discretização espacial do domínio é efetuada de duas formas. Basicamente, os sistemas de admissão e exaustão são delimitados em um determinado número de blocos que representem os dutos e bifurcações de fluxo. Contudo, é possível a divisão de um bloco em vários sub-volumes internos, compondo volumes de controles nodais interligados pelas fronteiras. O comprimento de discretização Δx é definido pelo usuário, e constitui uma forma prática de ajuste de refinamento de acordo com o objetivo de cada caso simulado e seus respectivos resultados. Na Figura 3 é apresentado um esquema de discretização arbitrário no qual as grandezas escalares são assumidas como uniformes para cada volume e as vetoriais são resolvidas nas fronteiras.

Figura 3 – Figura esquemática da abordagem da malha discretizada pelo software



Fonte: Adaptado de *GT-SUITE® Flow Theory Manual*, (2015b).

De acordo com o *GT-SUITE® Flow Theory Manual* (2015a), para simulações de motores de combustão interna, ao adotar-se o método da solução explícita é recomendável utilizar valores de discretização espacial Δx igual a 0,4 vezes o diâmetro do cilindro para admissão e 0,55 para exaustão. A diferença nos valores se dá pelo fato da velocidade do som nos dutos ser influenciada pela temperatura. Todavia, deve-se realizar um refinamento do comprimento Δx para estudos envolvendo fenômenos acústicos, quando a influência das ondas de pressão é muito importante, ou em casos com rotações acima de 6000 rpm, com fluxo a alta velocidade.

2.2.3. Correlação de Woschni para a transferência de calor

O software GT-SUITE[®] dispõe de vários modelos para o cálculo do coeficiente convectivo de transferência de calor. Dentre eles foi adotado para esse trabalho o modelo WoschniGT, o qual realiza um cálculo similar à correlação clássica de Woschni sem *swirl*. Segundo o GT-SUITE[®] *Engine Performance Manual (2015a)*, o usuário deve ter atenção ao aumento da transferência de calor nos eventos de válvula, principalmente devido à velocidade do fluxo direto da carga através das válvulas de admissão e também no *backflow* (fluxo reverso) através da exaustão.

Por meio do Modelo de Woschni, o coeficiente para a transferência de calor convectiva pode ser calculado de acordo com a Equação 6:

$$h_c = \frac{K_1 p^{0,8} w^{0,8}}{B^{0,2} T^{K_2}} \quad (6)$$

Na qual:

h_c é o coeficiente convectivo ($W/m^2 K$);

B é o diâmetro do cilindro (m);

K_1 é uma constante igual à 3,01426;

K_2 é uma constante igual à 0,50;

p é pressão no cilindro (kPa);

T é a temperatura do cilindro (K);

w é a velocidade média do gás no cilindro dada pela Equação 7 (m/s);

A Equação 7 descreve a velocidade média do gás dentro do cilindro:

$$w = C_1 \bar{S}_p + C_2 \frac{V_d T_r}{P_r V_r} (p - p_m) \quad (7)$$

Em que:

w é a velocidade média do gás no cilindro (m/s);

C_1 é uma constante igual a 6,18 nas trocas gasosas e 2,28 na compressão, combustão e expansão;

C_2 é uma constante igual a 0 nas trocas e na compressão e durante a combustão e expansão é igual a $3,24E-3$;

\bar{S}_p é a velocidade média do pistão (m/s);

T_r é a temperatura de trabalho do fluido antes da combustão (K);

p é a pressão instantânea do fluido (kPa);

p_m é a pressão do fluido no escoamento a frio (sem combustão) no mesmo ângulo de virabrequim que a pressão instantânea p (kPa);

P_r é pressão do fluido de trabalho antes da combustão (kPa);

V_d é Volume deslocado (m^3);

V_r é Volume de trabalho do fluido antes da combustão (m^3);

2.2.4. Modelo de combustão de duas zonas

De acordo com o GT-SUITE[®] *Engine Performance Manual (2015a)*, o *software* dispõe de uma metodologia para solução da combustão em duas-zonas para a maiorias dos seus modelos. O cálculo é realizado da seguinte forma: o cilindro é dividido em duas zonas, a zona não queimada e a zona queimada, sendo assim, no início da combustão, pré-definido pelo instante da centelha, todo o cilindro está preenchido pela zona não queimada. Qualquer fração de gás residual presente do ciclo anterior é incluído inicialmente nessa região. A mistura ar e combustível é a cada passo de tempo Δt transferida da zona não queimada para a zona queimada. A taxa de queima imposta ou calculada pelo modelo de combustão que irá definir a quantidade de ar/combustível a ser transferida.

Para cada passo de tempo um cálculo de equilíbrio químico é realizado para a zona queimada acumulada. O cálculo leva em consideração todas as espécies atômicas presentes (C, H, O, N, S e Ar), resultando em treze espécies como produtos da combustão (N_2 , O_2 , H_2O , CO_2 , CO , H_2 , N , O , H , NO , OH , SO_2 e Ar). A temperatura da reação influencia fortemente na concentração de equilíbrio das espécies da combustão, já a pressão exerce uma influência em menor proporção.

A energia interna de cada espécie é calculada a cada formação de uma nova fração da zona queimada. É realizado então o somatório da energia obtida de todas as espécies, podendo assim calcular a energia total liberada e obter da pressão no

cilindro, além das temperaturas das zonas não queimada e queimada, aplicando-se a lei da conservação da energia.

O modelo de combustão de duas zonas é descrito pelas Equações da energia 8 e 9, as quais são calculadas a cada passo de tempo. Pode-se ressaltar que no lado direito das Equações 8 e 9 estão presentes três termos comuns às duas equações que se referem da esquerda para a direita, respectivamente, ao trabalho da pressão, à transferência de calor e à combustão, sendo que o último termo está relacionado taxa instantânea de consumo de combustível e a entalpia adicional referente à injeção de combustível, presente apenas na Equação 8.

Zona não queimada:

$$\frac{d(m_u e_u)}{dt} = -p \frac{dV_u}{dt} - Q_u + \left(\frac{dm_f}{dt} h_f + \frac{dm_a}{dt} h_a \right) + \frac{dm_{f,i}}{dt} h_{f,i} \quad (8)$$

Zona queimada:

$$\frac{d(m_b e_b)}{dt} = -p \frac{dV_b}{dt} - Q_b + \left(\frac{dm_f}{dt} h_f + \frac{dm_a}{dt} h_a \right) \quad (9)$$

Sendo que os índices u e b referem-se, respectivamente, às zonas não queimada e queimada. Tem-se também que:

$m_{u,b}$ é a massa das zonas não queimada e queimada;

m_f é a massa de combustível;

m_a é a massa de ar;

$m_{f,i}$ é a massa de combustível injetado;

$e_{u,b}$ é a energia das zonas não queimada e queimada;

p é a pressão no cilindro;

$V_{u,b}$ é o volume das zonas não queimada e queimada;

$Q_{u,b}$ é a taxa de transferência de calor das zonas não queimadas e queimadas;

h_f é a entalpia da massa de combustível;

h_a é a entalpia da massa de ar;

$h_{f,i}$ é a entalpia da massa de combustível injetado;

2.2.5. Correlação de Wiebe para fração de massa queimada

Segundo Heywood (1988), a abordagem termodinâmica para cálculo da fração de massa queimada é dada pela Equação 10 de Wiebe:

$$x_b = \exp\left[-a\left(\frac{\theta-\theta_0}{\Delta\theta}\right)^{m+1}\right] \quad (10)$$

Na qual:

x_b é a fração de massa queimada;

θ é o ângulo de virabrequim;

θ_0 é o ângulo de início da combustão;

$\Delta\theta$ é a duração da combustão em graus;

a e m são parâmetros de ajuste, com valores usuais de $a = 5$ e $m = 2$;

Os ajustes dos parâmetros a e m da Equação 10 são realizados de forma a adequar a curva para diferentes geometrias, combustíveis e outras possíveis divergências, como posição da velas de ignição, dentre outros (MELO, 2012).

2.2.6. Análise das curvas de pressão e cálculo da fração de massa queimada

A metodologia de cálculo da fração de massa queimada através da curva de pressão é denominada cálculo reverso, por constituir uma forma não convencional de modelagem da combustão. Isso ocorre devido aos dados de entrada utilizados nesse tipo de simulação serem geralmente os resultados de modelos não-preditivos de combustão, como a função de Wiebe, descrita pela Equação 10, a qual é nomeada como cálculo direto, já que realiza o cálculo da pressão no cilindro diretamente pela imposição da fração de massa queimada obtida experimentalmente.

Em ambos os métodos é adotada a mesma metodologia de cálculo para combustão, utilizando o modelo de duas zonas apresentado nas Equações 8 e 9. Sendo assim, no cálculo reverso, a cada passo de tempo Δt , uma quantidade de combustível é transferida da zona não queimada para a zona queimada, no qual iterações são realizadas objetivando a correlação da curva de pressão no cilindro numérica e experimental.

No *software* GT-SUITE[®] existem duas formas de se realizar o cálculo reverso. A primeira forma é utilizando-se o método *stand-alone burn rate calculation*, que significa cálculo autônomo da fração de massa queimada, o qual utiliza apenas a pressão medida no cilindro por ângulo de virabrequim. Já a segunda forma de cálculo utiliza o método denominado *TPA (three pressure analysis)*, no qual é realizada a análise das pressões medidas na admissão, exaustão e no cilindro por ângulo de virabrequim. Os dois métodos se diferem quanto ao tamanho do domínio, condições de contorno, tempo computacional e resultados.

O método *stand-alone burn rate calculation* exige um domínio extremamente simples com apenas os blocos do cilindro, trem de manivelas e injetor, e apresenta tempo computacional inferior quando comparado ao método *TPA*. Contudo, para esse método são necessárias condições de contorno difíceis de serem medidas experimentalmente, como a massa de ar aprisionada no cilindro.

No método *TPA* é adotado um domínio maior que deve abranger, no mínimo, desde os pórticos de admissão até os de exaustão. Conforme apresentada no GT-Suite[®] *Engine Performance Manual (2015)*, a metodologia utilizada para esse tipo de simulação segue os seguintes passos:

- Utilização de uma taxa de queima arbitrária no primeiro ciclo;
- Nenhuma análise de pressão é realizada e os dados relacionados à transferência de calor e perfil de injeção são armazenados para serem utilizados no segundo ciclo;
- Interrupção do cálculo direto da pressão no cilindro por meio da fração de massa queimada no início de cada ciclo, do segundo caso em diante;
- Realização do cálculo da fração de massa queimada no cilindro, mediante análise das três pressões (na admissão, no cilindro e na exaustão), condições iniciais definidas para o gás no cilindro (adota-se comumente no GT-ISE[®] o ângulo de fechamento da válvula de admissão como o início da simulação), taxa de transferência de calor e perfil de injeção;
- Continuação do cálculo direto da pressão utilizando a fração de massa queimada calculada no passo anterior;
- Repetição dos ciclos até atingir a condição de convergência.

2.2.7. Modelo de combustão preditiva

Segundo Li *et al.*(2015) e Martins e Lanzanova (2015), o modelo quase-dimensional para a chama turbulenta, constitui uma metodologia preditiva para o cálculo da combustão, isso significa que a taxa de queima é calculada, diferente da abordagem apresentada pela correlação de Wiebe na Equação 10. Por isso, 1010 se trata de uma abordagem mais complexa que considera vários fatores, como a geometria da câmara de combustão. Sendo assim, dados referentes à caracterização do escoamento de ar dentro do cilindro, propriedades do combustível e características relacionadas à vela de ignição, como o tempo, o comprimento e a localização da centelha, fazem do modelo uma importante ferramenta no estudo de fenômenos difíceis de serem medidos experimentalmente. Pode-se citar como exemplo de aplicação desse modelo a exploração do fenômeno da detonação em condições mais críticas, para as quais alguns motores são estruturalmente limitados.

De acordo com *Engine Performance Manual* (2015a), Wang *et al.* (2016), Li *et al.* (2016) e Blizard e Keck (1974) o modelo de combustão preditiva para a chama turbulenta é descrito pelas Equações de 11 a 18. O equacionamento desenvolvido para esse modelo, apresentada a relação entre a taxa de queima e os quatro parâmetros utilizados para a calibração do modelo em relação aos dados experimentais, são eles: o m_1 , o m_2 , o m_3 e o DEM .

$$\frac{dm_b}{dt} = \rho_u A_f S_L^* + \frac{m_e - m_b}{\tau_b^*} \quad (11)$$

$$\frac{d(m_e - m_b)}{dt} = \rho_u A_f u_t^* (1 - e^{-\frac{t}{\tau_b^*}}) - \frac{(m_e - m_b)}{\tau_b^*} \quad (12)$$

$$S_L^* = m_1 S_L \quad (13)$$

$$u_T^* = m_2 0,08 \bar{u}_i \left(\frac{\rho_i}{\rho_u} \right)^{0,5} \quad (14)$$

$$I_m^* = m_3 0,8 L_{iv} \left(\frac{\rho_i}{\rho_u} \right)^{0,75} \quad (15)$$

$$\tau_b = \frac{l_m^*}{S_L} \quad (16)$$

$$S_L = [B_m + B_\phi (\phi - \phi_m)^2] \left(\frac{T_u}{T_{ref}} \right)^a \left(\frac{p}{p_{ref}} \right)^B f(Dilution) \quad (17)$$

$$f(Dilution) = 1 - 0,75 DEM [1 - (1 - 0,75 DEM Dilution)^7] \quad (18)$$

Nas quais:

m_e é a massa de ar/combustível não queimada arrastada para a superfície da frente de chama;

t é o tempo;

ρ_i e ρ_u é a densidade da massa de ar/combustível não queimada no tempo da admissão e da centelha respectivamente;

A_f é a área superficial da frente de chama para onde a massa de ar/combustível é arrastada;

S_T é a velocidade de chama turbulenta;

S_L é a velocidade de chama laminar;

m_b é a massa queimada;

τ_b^* é o tempo característico de queima;

l_m^* é o comprimento da microescala de Taylor;

\bar{u}_i é velocidade média da carga na admissão através das válvulas;

L_{iv} é levantamento de válvula na admissão;

u_T^* é velocidade turbulenta de chama;

m_1 é o multiplicador do crescimento do kernel (núcleo da chama);

m_2 é o multiplicador da velocidade turbulenta de chama;

m_3 é o multiplicador do comprimento da microescala de Taylor;

DEM	é o multiplicador do efeito da diluição na velocidade laminar de chama;
B_m	é a máxima velocidade laminar de chama;
B_ϕ	é o valor de decaimento velocidade laminar;
ϕ	é razão de equivalência no cilindro;
ϕ_m	é a razão de equivalência na máxima velocidade laminar de chama;
p	é pressão;
p_{ref}	é 101325 Pa (pressão atmosférica de referência);
T_{ref}	é a temperatura ambiente de referência, 298 K;
T_u	é temperatura da mistura ar/combustível não queimado;
$Dilution$	é Fração de massa residual na zona não queimada
a	é o expoente de temperatura;
β	é o expoente de pressão;
$f(Dilution)$	é o efeito da diluição na velocidade laminar de chama;

2.2.8. Modelo de detonação

Modelos fenomenológicos devido a sua simplicidade estão sendo amplamente empregados para simulações de ciclos de operação em motores de combustão interna. Modelos dessa natureza, ao invés de abordar um equacionamento cinético químico detalhado, resolvem o problema em um único passo (CHEN *et al.*, 2014). A Equação 19 descreve uma metodologia para a verificação numérica da ocorrência da detonação denominada *KITI* (*Knock Induction Time Integral*), que em português significa Integral do Tempo de Indução da Detonação. Derivada da equação de Arrhenius, essa integral foi adaptada por Livengood e Wu (1955), para predição da detonação em motores alternativos. Tal metodologia consiste em integrar desde o instante do início da simulação (na abertura da válvula de admissão) até o instante em que se inicia a detonação, correlacionado o Número de Octanos do combustível ou mistura utilizada na análise, como pode ser verificado através da Equação 20. Considera-se então que quando o *KITI* apresentar resultado igual ou superior a 1 que ocorreu a detonação. O tempo

de indução da detonação τ_k , apresentado pela Equação 20, constitui uma correlação proposta por Douaud e Eyzat (1978).

$$KITI = \int_{t_{IVC}}^{t_{knock}} \left(\frac{1}{\tau_k}\right) dt \quad (19)$$

$$\tau_k = 17,68 \left(\frac{ON}{100}\right)^{3,402} P^{-1,7} e^{\frac{3800}{T}} \quad (20)$$

Em que:

t_{knock} é o instante em que ocorre a detonação;

t_{IVC} é o instante onde se inicia a simulação;

τ_k é o tempo de indução da detonação;

ON é o número de octanos do combustível;

P e T é a pressão e a temperatura da fração final da mistura ar/combustível não queimado antes de ser consumido pela frente de chama;

2.3. Estado da arte

Em sua tese, Melo (2012) investigou numericamente e experimentalmente a influência de diversas misturas de etanol hidratado na gasolina em um motor flex. A pesquisa resultou em uma vasta gama de dados de desempenho e emissão. Na área numérica foi explorada a sensibilidade do modelo não-preditivo de combustão para imposição da fração de massa queimada, utilizando a função de Wiebe de duas zonas e o mecanismo de cinética química para o modelamento de emissões, incluindo aldeídos e hidrocarbonetos não queimados. Na Equação de Wiebe foi utilizado o valor de 1 para o parâmetro m e para o parâmetro a foi realizado um ajuste empírico. Observou-se um acréscimo ao parâmetro a conforme o aumento do teor de etanol na gasolina até a mistura E80 (80% de etanol hidratado e 10% de gasolina). Os resultados numéricos apresentaram uma correlação satisfatória com os dados experimentais com divergências inferiores a 5%.

Uma caracterização computacional unidimensional com validação experimental foi realizada por Roso (2012), utilizando o *software* GT-SUITE[®], para um motor Diesel típico de grupos geradores. O autor ressaltou os possíveis motivos

de divergência ao comparar os resultados numéricos com os experimentais, sendo eles: a não caracterização do spray em modelos de combustão unidimensionais, nos quais não são especificados detalhes da câmara de combustão, os detalhes relacionados à vela de ignição e a adoção de modelos de transferência de calor considerados simples ou incapazes de reproduzir o fenômeno na combustão.

Foi realizada uma análise experimental e numérica por Lanzaova (2013) da utilização de etanol com teor de hidratação de até 40% em um motor ciclo diesel adaptado para operar em ciclo otto. A caracterização numérica da combustão foi realizada através do método *TPA*, no qual foram avaliadas as pressões na admissão, no cilindro e na exaustão em função do ângulo de virabrequim. Resultados para mistura de 30% de água no etanol apresentaram ganhos em eficiência térmica.

Uma metodologia foi desenvolvida por de Souza (2010) para a otimização de um coletor de admissão. A análise de parâmetros como a eficiência volumétrica, vazão mássica, temperatura e a pressão foi realizada numericamente com validação experimental. Como resultado foi possível a construção de um coletor inédito de admissão, com ganhos de eficiência volumétrica de 6% a 3500 rpm.

Jo *et al.* (2014) desenvolveram um trabalho com o objetivo de explorar os limites de detonação de um motor turbo comprimido operando com vários teores de etanol misturados à gasolina. Além disso, foram analisados os efeitos de vários parâmetros operacionais sobre a eficiência do motor. Os testes foram realizados utilizando um motor turbo com injeção direta de combustível e ignição por centelha. O *software* GT-SUITE[®] foi utilizado para determinar a influência da razão volumétrica de compressão nos limites do funcionamento do motor, além de analisar a eficiência global em cada caso estudado. Utilizando-se o *software*, foi possível a geração de um mapa de desempenho do motor ao longo de toda a gama de funcionamento. O modelo foi validado com resultados experimentais nas regiões nas quais era seguro operar o motor experimentalmente. Sendo assim, o modelo foi usado para extrapolar condições além dos limites de operação do motor, ajustando as condições de operação e geometria do motor. A partir dessa pesquisa foram alcançados os seguintes resultados:

- Os limites de detonação de dois tipos de gasolina, RON 91 e 96, e quatro misturas de etanol-gasolina, E10, E20, E25 e E85, foram testados;
- O limite de detonação foi definido de acordo com o nível de carga no qual o motor não consegue operar no *MBT*;
- As gasolinas com RON 91 e 96 apresentaram um limite de detonação igual a 10 e 13 bar de BMEP, respectivamente;
- A adição de etanol permitiu operar o motor no *MBT* com carga acima de 13 bar de BMEP;
- O motor foi operado sem detonação utilizando E85, sendo que o retardo de ignição foi aplicado apenas em cargas acima de 18 bar de BMEP;
- O limite de detonação do motor não se alterou significativamente com a rotação;
- O aumento da razão volumétrica de compressão de 9,2 para 11,5 e de 11,5 para 13,5 apresentaram ganhos de eficiência de conversão de combustível de frenagem de 5,7% e 1,8%, respectivamente, mostrando rendimentos decrescentes de eficiência com o aumento da razão volumétrica de compressão.

Li *et al.* (2015) propuseram um estudo numérico, utilizando o *software* GT - Suite[®], com o objetivo de modificar um motor de quatro cilindros, ignição por centelha, turbo alimentado, quatro tempos e com injeção de combustível no pórtico de admissão, para um motor que fosse composto por três cilindros, com dois cilindros operando normalmente em quatro tempos e um trabalhando apenas nos ciclos de expansão e exaustão. A metodologia numérica adotada pelos autores neste estudo consistiu na validação do modelo do motor original com os dados experimentais. A partir do modelo validado foi então elaborado o novo modelo proposto. A pressão na admissão para plena carga precisou ser aumentada em relação ao motor original para manter o mesmo desempenho e a razão volumétrica de compressão foi reduzida para evitar a detonação. Em relação ao motor original, foi alcançada uma eficiência térmica 4% superior. Mediante a análise do balanço de energia, foi observado um aumento da eficiência da combustão e redução da energia dos gases da exaustão. Em suma, o trabalho realizado pelo tempo de

expansão adicional foi o principal responsável pelo aumento da eficiência de conversão de combustível em médias e elevadas cargas.

Gervásio (2017) desenvolveu em seu trabalho um modelo unidimensional para a análise numérica termofluidodinâmica de um motor de ignição por centelha, operando com E22, utilizando o *software* GT - SUITE[®]. Por meio da elaboração desse modelo, o autor buscou demonstrar a relevância desse tipo de análise no desenvolvimento dos MCI, principalmente em fase de projeto, já que acarreta em ganho de tempo e diminuição de custos, pois essa análise dispensa processos de tentativa e erro em caros protótipos. A metodologia desse trabalho consistiu na validação do modelo com dados experimentais utilizando previamente um modelo prescritivo de combustão baseado na função de Wiebe, conforme descrito na Equação 10, em que a fração de massa queimada é imposta pelo *MBF* 50% (ângulo de virabrequim referente a 50% de massa queimada) e pela duração de queima correspondente ao *MBF* 10 a 90% (duração em ângulos de virabrequim da fração de massa queimada no intervalo de 10 a 90%), obtidos dos dados adquiridos experimentalmente. Posteriormente, foi implementado e calibrado um modelo preditivo de combustão que, por constituir uma abordagem mais complexa do fenômeno, permite ir além da simples reprodução dos dados experimentais, sendo então capaz de realizar uma análise numérica abrangente e extrapolar essas condições. Sendo assim, esse modelo consiste em uma ferramenta extremamente útil na análise de operações e fenômenos não explorados experimentalmente, como no estudo de regimes sobrealimentados, nos quais foram analisadas apenas condições aspiradas, ou na exploração da detonação para condições disponíveis apenas no *MBT*. Para isso, é necessária a adoção de condições iniciais e de contorno mais detalhadas, como nas condições iniciais no cilindro, no modelo de turbulência implementado e nos dados referentes à caracterização da câmara de combustão.

Gervásio (2017) acrescenta que a relevância do modelo preditivo de combustão está na capacidade de fornecer resultados como a temperatura na câmara de combustão, fração de massa queimada, pressão no cilindro em função do ângulo de virabrequim e etc., sem a necessidade de imposição de dados experimentais referentes à combustão. Tais resultados são possíveis de se alcançar, através de uma criteriosa calibração da combustão utilizando quatro parâmetros: o

TFSM – turbulent flame speed multiplier, TLSM – taylor length scale multiplier, FKGM – flame kernel growth multiplier e DEM – dilution exponent multiplier. A calibração desses parâmetros é realizada através da otimização de resultados preditivos com os não-preditivos (prescritivos) validados com os dados experimentais, como a taxa de queima, pressão no cilindro por ângulo de virabrequim e IMEP (pressão média efetiva indicada). Uma vez calibrado, o modelo de combustão foi utilizado pelo autor para o estudo numérico da implementação de um sistema de sobrealimentação que melhor se adequasse ao motor originalmente aspirado.

Martins e Lanzaova (2015) investigaram numericamente o ciclo Miller em um motor de ignição por centelha em plena carga, sobrealimentado e operando com etanol. O ciclo Miller constitui numa técnica, aplicada em motores de combustão interna desde a década de 40, que aumenta a razão de expansão visando atingir maiores níveis de eficiência global do sistema. Uma razão de expansão maior que a de compressão é alcançada mediante fechamento tardio das válvulas de admissão. Sendo assim, parte do tempo de compressão irá ocorrer com as válvulas de admissão abertas. Tal procedimento, todavia, desfavorece o enchimento do cilindro e conseqüentemente o trabalho que será gerado pela combustão no tempo de expansão, necessitando assim de sobrealimentação para se equiparar ao ciclo otto. Esse tipo de operação sem a sobrealimentação é caracterizado como ciclo Atkinson.

Para esse trabalho, Martins e Lanzaova (2015) exploraram o ciclo Miller utilizando a simulação numérica unidimensional, por intermédio do *software* GT - Suite[®], para estudar períodos de fechamento das válvulas de admissão e sua influência na eficiência global do sistema. Foram alcançados melhores valores de eficiência global para tempos mais adiantados de fechamento das válvulas de admissão. Para tempos mais atrasados, identificaram-se perdas por bombeamento, mesmo com sobrealimentação, tornando essa opção menos atrativa.

Hvězda (2014) investigou a implementação de modelos desenvolvidos pelo usuário no *software* GT-SUITE[®] ao invés da utilização de modelos já disponibilizados no *software*. O modelo criado pelo autor baseia-se em um código para a simulação termodinâmica e cinética química da combustão multi-zona em MCI de quatro tempos. Mediante seu acoplamento no bloco referente ao cilindro do motor a ser simulado, o código escrito em Fortran é utilizado no cálculo de 23 de

reações químicas referentes à combustão com 11 espécies envolvidas, assim como no cálculo da transferência de calor, nos períodos entre o fechamento da válvula de admissão até a abertura da válvula de exaustão, ou seja, apenas no intervalo onde não há fluxo de massa (ou trocas gasosas). Apesar dessa pesquisa não apresentar validação numérica em relação aos dados experimentais, o modelo desenvolvido e implementado no *software* GT-SUITE[®] se mostrou capaz de simular o período referente à combustão e possui como diferencial em relação aos demais modelos disponíveis no *software* o cálculo da transferência de calor e a abordagem mais completa da cinética química.

Os trabalhos apresentados nesse tópico foram de suma importância para a composição de conhecimento crítico sobre o assunto, enfatizando a importância da análise numérica unidimensional no estudo de motores de combustão interna, sobretudo no desenvolvimento de uma metodologia para o estudo do fenômeno da detonação.

3. METODOLOGIA

Neste capítulo será descrita a metodologia numérica utilizada nesse trabalho para o desenvolvimento de um modelo unidimensional por meio do *software* GT-SUITE[®] para o estudo de condições adquiridas experimentalmente pela equipe do Centro de Tecnologia da Mobilidade – CTM-UFMG, em um motor monocilíndrico de pesquisa (*SCRE*), cujo propósito principal é o estudo da combustão. Esse capítulo é constituído da especificação do motor utilizado, procedimentos realizados para a criação do modelo unidimensional, análise da detonação e critérios adotados na validação dos modelos utilizados.

Para a criação do modelo, foi necessário realizar o tratamento do *CAD* do motor, a extração do seu volume interno, a discretização espacial do seu domínio e conversão da geometria 3D para o ambiente 1D, onde é executada a simulação. Foi elaborado um tópico específico para a descrição de cada bloco utilizado na simulação unidimensional, como os blocos para a caracterização das fronteiras do domínio, dos dutos, das válvulas, do injetor, do trem de manivelas do motor e do cilindro.

No tópico elaborado para descrever a metodologia desenvolvida para a análise da detonação são apresentadas as nove condições experimentais escolhidas. As primeiras três condições foram arbitrariamente escolhidas operando em *MBT* e com detonação (compondo seis casos), com o objetivo de avaliar a sensibilidade do modelo de detonação Douaud & Eyzat disponível no *software*, através da Integral do Tempo de Indução da Detonação (KITI), apresentado no tópico 2.2.8. deste trabalho. Para condições aquisitadas apenas em *MBT*, três casos foram escolhidos para a exploração da condição de detonação, por meio do modelo preditivo de combustão calibrado, denominado SITurb. Posteriormente, foi elaborado um subtópico dedicado a cada modelo de combustão utilizado neste trabalho para o estudo do fenômeno da detonação, sendo eles o modelo prescritivo (Wiebe) e o modelo preditivo (SITurb).

3.1. Especificação do Motor e aquisição de dados experimentais

Neste trabalho foi utilizado um motor monocilíndrico de pesquisa da empresa AVL[®]. Para esse trabalho, optou-se pelo uso de injeção direta de combustível tipo

air-guided e um pistão projetado especificamente para esse tipo de configuração pela equipe experimental CTM-UFGM.

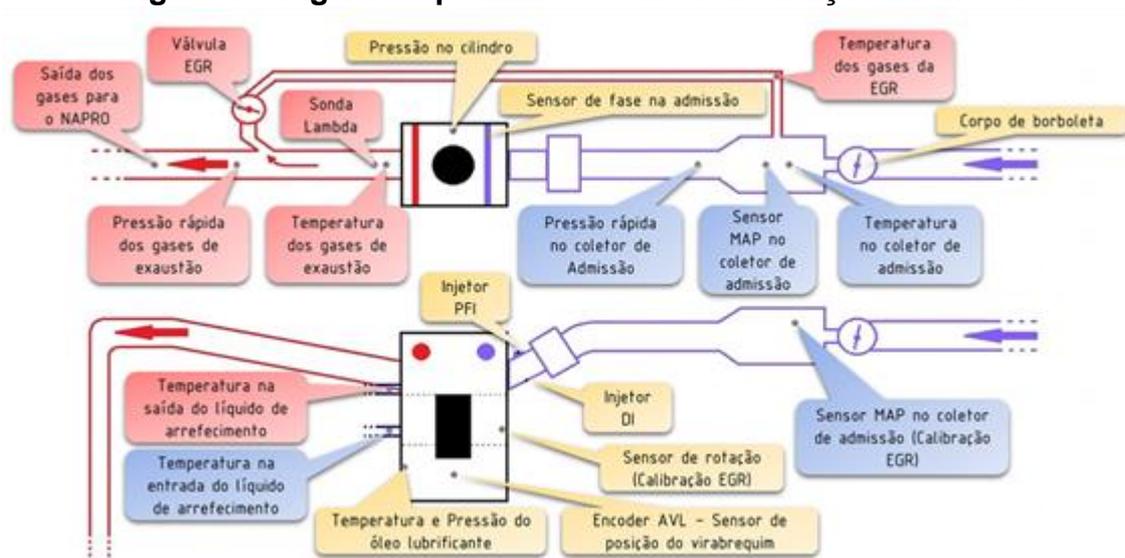
Os dados do motor estão indicados na Tabela 1 e na Figura 4 apresenta-se de forma esquemática como foi realizado a sua instrumentação pela equipe experimental.

Tabela 1 – Dados do motor monocilíndrico de pesquisa

Item	Dimensões
Diâmetro do cilindro [mm]	82,00
Curso [mm]	86,00
Comprimento da biela [mm]	144,00
Offset no pistão [mm]	0,50
Volume deslocado [L]	0,45
Número de válvulas	4
Razão volumétrica de compressão	11,50
Razão diâmetro do cilindro/curso	0,95

Fonte: Adaptado da equipe experimental CTM-UFGM, 2017.

Figura 4 – Figura esquemática da instrumentação do motor



Fonte: Adaptado da equipe experimental CTM-UFGM, 2017.

As condições aquisitadas experimentalmente foram realizadas operando com misturas de combustíveis entre E0 e E100, para rotações de 1250 rpm até 5000 rpm e cargas entre 2 a 10 bar de IMEP. Os dados foram compilados para planilhas e entregues para a equipe de simulação do CTM-UFMG.

Para os ensaios, foram adquiridos os combustíveis E0 (gasolina) e E100 (etanol hidratado) para posterior realização das misturas. Uma análise dos combustíveis foi realizada pelo LEC – Laboratório de ensaio de combustíveis da UFMG, para a obtenção do PCI e teor em volume de etanol nas misturas com a gasolina. Os dados são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2 – Dados dos combustíveis

	E0	E10	E22	E27	E30	E50	E70	E85	E100
Teor de etanol anidro, %v/v	0	12	24	29	33	51	71	84	100
PCI (MJ/kg)	42,24	38,73	34,34	33,75	32,83	30,64	27,72	28,60	25,55

Fonte: LEC – Laboratório de Ensaio de Combustíveis da UFMG

3.2. Criação do modelo utilizando o software GT-SUITE®

Neste tópico são apresentadas as etapas para a elaboração do modelo unidimensional utilizando o *software* GT-SUITE®. Ao final, deseja-se que o modelo reproduza numericamente as condições experimentais analisadas.

O detalhamento das condições experimentais de operação exploradas, assim como os modelos de combustão utilizados, será apresentado do tópico 3.3 (Análise da Detonação).

3.2.1. CAD do motor

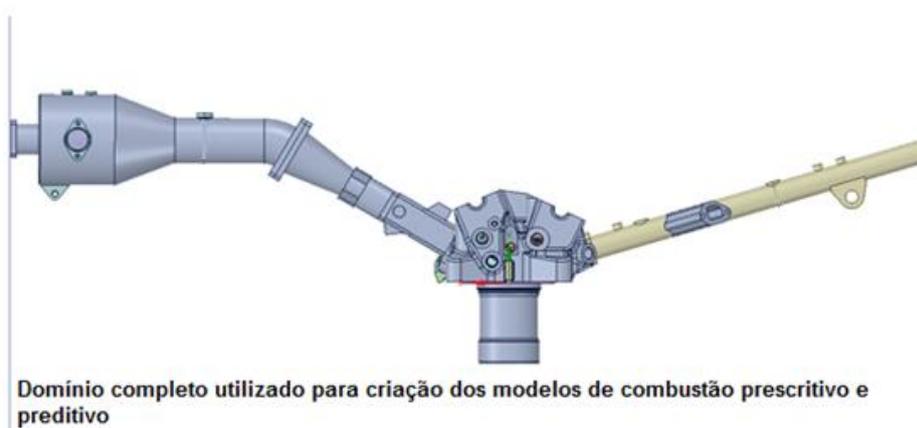
Os arquivos CAD do motor foram disponibilizados pelo fabricante, a empresa AVL®, e os demais componentes pela equipe experimental, já que foram desenvolvidos no CTM-UFMG.

As ferramentas utilizadas para o tratamento da geometria fazem parte da plataforma do GT-SUITE®. Foi utilizado o *software* SpaceClaim® para realização de reparos na geometria, pois, devido a defeitos, o cabeçote não se apresentava como um sólido, impossibilitando a extração de seu volume interno. Sendo assim, os

reparos possibilitaram a transformação do cabeçote em um sólido para posterior extração do seu volume interno.

Na Figura 5 é apresentada a geometria completa do motor, com planos posicionados nas suas fronteiras, indicando o domínio utilizado para a elaboração do modelo no qual foi implementada a combustão prescritiva e preditiva.

Figura 5 – Geometria completa do motor



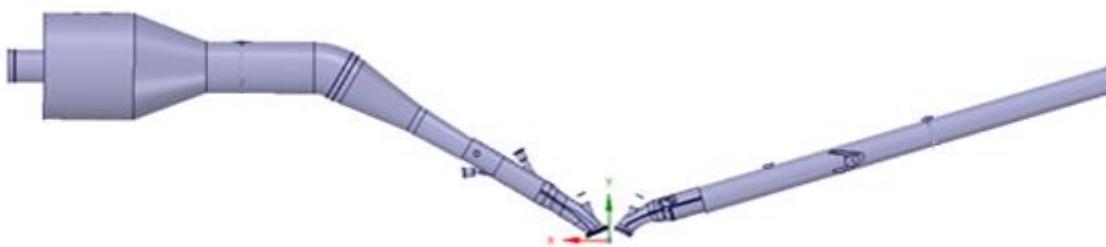
Fonte: Próprio Autor, 2017

3.2.2. Extração do volume interno

Nas simulações de motores de combustão interna *CFD*, mesmo em abordagens mais simplificadas como a 0/1D, que é adotada neste trabalho, o domínio de interesse é o escoamento do fluido através do motor. Com isso, adota-se uma prática de extração do volume interno do *CAD* do motor estudado.

O *software* SpaceClaim[®] dispõe de ferramentas necessárias para a realização desse procedimento, como pode ser observado pelo volume interno do motor obtido e ilustrado na Figura 6.

Figura 6 – Volume interno do motor com planos localizados nos sensores de admissão e exaustão



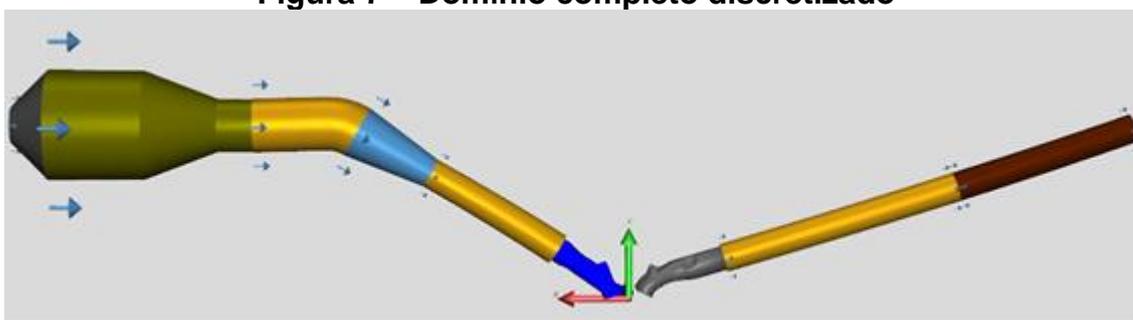
Fonte: Próprio Autor, 2017

3.2.3. Discretização espacial do Domínio

Como descrito anteriormente, a discretização espacial do domínio foi realizado de duas formas: na criação dos blocos que representam os dutos e na divisão dos volumes dos blocos em sub-volumes internos.

O software GEM-3D[®] foi utilizado para a importação do volume interno, delimitação das fronteiras de interesse e conversão da geometria do volume interno no diagrama de blocos para o ambiente do software GT-ISE[®] (*Integrated Simulation Environment*), software que é dedicado principalmente a simulação 0/1D de motores de combustão interna. Na conversão da geometria, o software realiza algumas simplificações necessárias, as quais estão ilustradas na Figura 7.

Figura 7 – Domínio completo discretizado



Fonte: Próprio Autor, 2017

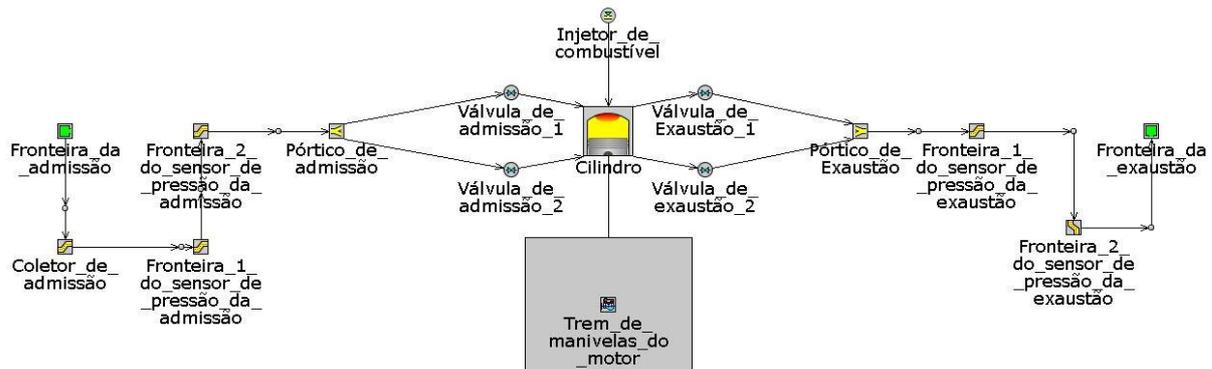
3.2.4. Descrição dos blocos utilizados

A partir da discretização espacial dos dutos e conversão para o ambiente do software GT-ISE[®] (*Integrated Simulation Environment*), é possível a construção do modelo unidimensional que representa o motor em estudo. O GT-ISE[®] possui uma biblioteca de blocos específicos para simulação de motores de combustão interna, abrangendo desde objetos de fronteiras para o ambiente externo até objetos que representem os mais variados tipos de válvulas, injetores, sensores, atuadores, cilindros e bloco do motor.

Com o intuito de auxiliar na interface entre o usuário e a simulação, cada bloco dispõe de espaços para condições iniciais e de contorno, assim como para acoplamento de modelos adicionais necessários. Os blocos são projetados de forma a resolver um equacionamento específico e se conectar aos demais em uma

estrutura lógica que melhor represente o modelo em estudo. O modelo elaborado neste trabalho é apresentado na Figura 8 e posteriormente serão detalhados cada um dos blocos utilizados.

Figura 8 – Domínio completo utilizado para os modelos de combustão prescritivo e preditivo



Fonte: Próprio Autor, 2017

3.2.4.1. Caracterização das fronteiras

Para a caracterização das fronteiras do domínio, utiliza-se o modelo *EndEnvironment*, disponível na biblioteca do *software*, no qual se insere apenas a pressão e temperatura médias na admissão e exaustão e o modelo que caracteriza o fluido que passa através dessa parte do domínio.

3.2.4.2. Caracterização dos dutos

A caracterização dos dutos a partir da discretização espacial efetuada pelo GEM-3D[®] foi realizada utilizando o domínio completo, conforme apresentado pela Figura 8. Foram utilizados blocos do tipo *FlowSplitGeneral* para a reprodução da bifurcação de fluxo e o *PipeTable*, que é capaz de representar uma tubulação com vários diâmetros ao longo do seu comprimento.

Para esses dois tipos de blocos foram adotados a pressão instantânea no ângulo de fechamento da válvula de admissão, momento no qual normalmente inicia-se a simulação no GT-ISE[®], e a temperatura média na admissão e exaustão para as condições de inicialização do fluido. Para os multiplicadores dos coeficientes de transferência de calor manteve-se o valor 1.

Na temperatura de parede é usual utilizar-se como referência a temperatura dos fluidos de arrefecimento disponibilizados pela equipe experimental, que foi de 363K. Contudo, as temperaturas de parede nos dutos, principalmente o da admissão, constituem um parâmetro de ajuste para a validação da vazão mássica de ar, já que se trata de um modelo simplificado.

Deve-se ter atenção ao coeficiente de perda de carga nos pórticos de admissão e exaustão quando eles fazem parte do cabeçote, pois no cálculo do coeficiente de descarga para as válvulas a perda de pressão por atrito na região é considerada. Então, é necessário zerar esse coeficiente nos pórticos para evitar que a perda de carga seja calculada em dobro.

No modelo adotou-se para discretização dos dutos um valor recomendado pelo software igual a 0,4 vezes o diâmetro do cilindro para a admissão e 0,55 vezes o diâmetro do cilindro para a exaustão.

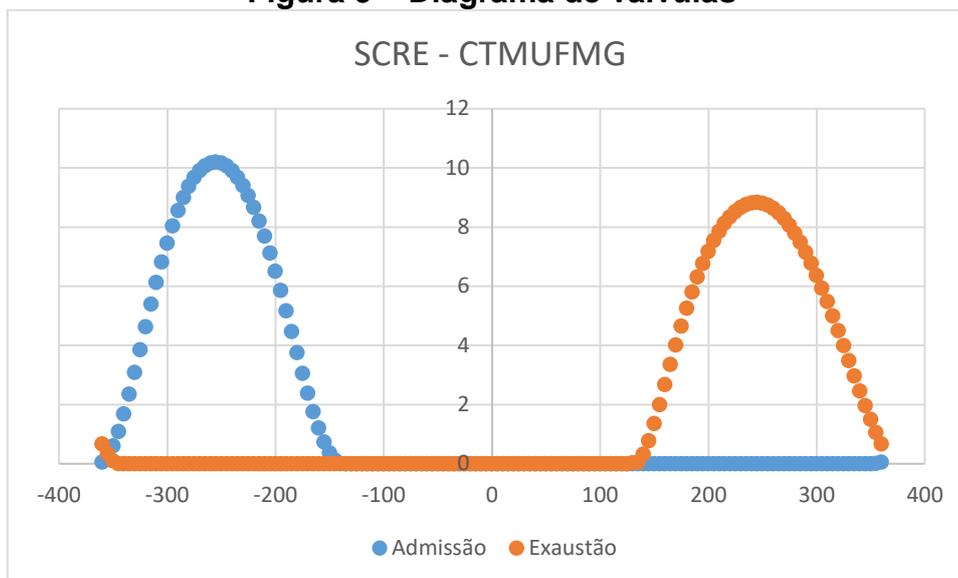
3.2.4.3. Caracterização das válvulas

A caracterização das válvulas é realizada através do bloco *ValveCamConn*, que necessita basicamente dos diâmetros das válvulas de admissão, 31,1 mm, e da exaustão, 28 mm. A folga das válvulas é considerada 0 por se tratar de tucho hidráulico.

O diagrama de abertura das válvulas foi medido pela equipe experimental do CTM-UFMG e é apresentado na Figura 9. O coeficiente de descarga foi simulado pela equipe de simulação *CFD-3D* utilizando o *software* Converse[®], conforme é demonstrado nos diagramas das Figura 10 e da Figura 11.

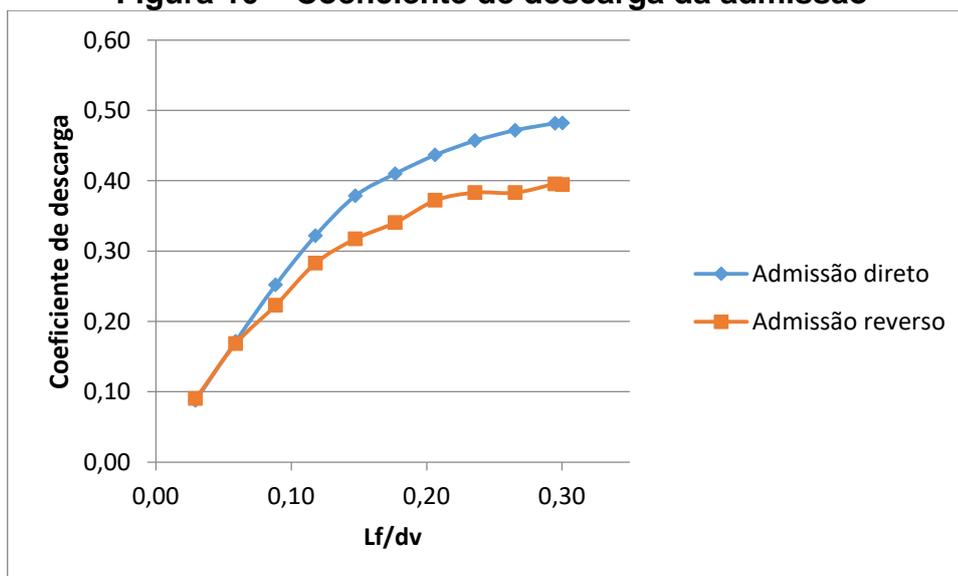
Utilizando-se o bloco *ValveCamConn* é possível ainda fazer a transladação do diagrama de abertura das válvulas em relação ao início de abertura, com o intuito de analisar novos diagramas de forma rápida ou corrigir possíveis erros de medição.

Figura 9 – Diagrama de válvulas



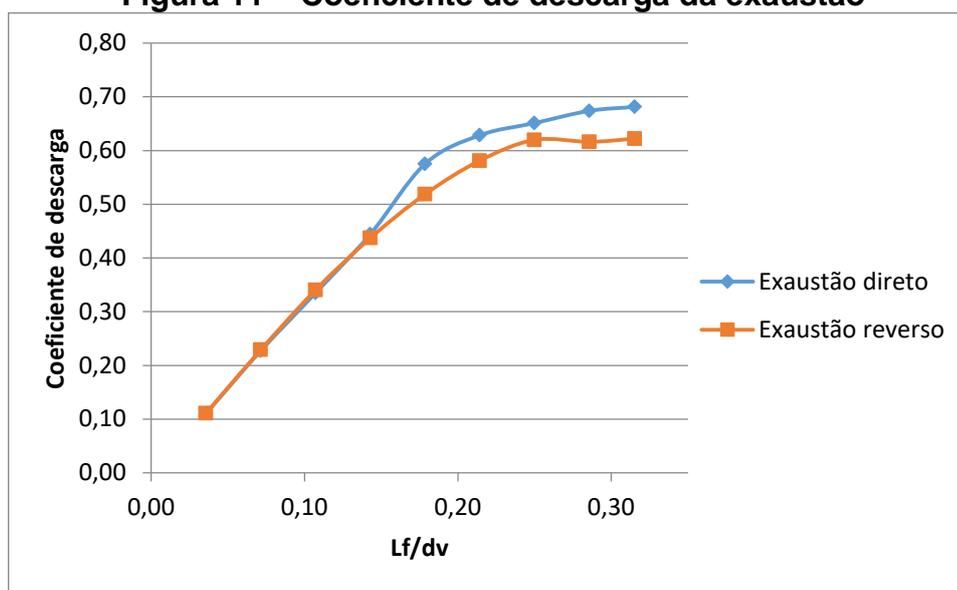
Fonte: Adaptado da equipe experimental CTM-UFMG, 2017

Figura 10 – Coeficiente de descarga da admissão



Fonte: Adaptado da equipe experimental CTM-UFMG, 2017

Figura 11 – Coeficiente de descarga da exaustão



Fonte: Adaptado da equipe experimental CTM-UFGM, 2017

3.2.4.4. Caracterização do injetor

A injeção foi modelada a partir do bloco *InjPulseConn*, que dispõe de opções de dados de entrada como a vazão mássica de injeção, a largura do pulso e massa de combustível injetada por ciclo. A solução desse modelo consiste na escolha pelo usuário de dois desses dados de entrada, pois assim pode-se calcular o terceiro.

Para as misturas de combustíveis foi utilizado um modelo de mistura de espécies denominado *FluidMixtureCombined*. Além disso, são inseridos o tempo de injeção, a temperatura do combustível e dados do injetor utilizado. No caso da simulação da injeção direta, é necessário ainda definir dados adicionais, como diâmetro do orifício, número de furos e coeficiente de descarga.

3.2.4.5. Caracterização do trem de manivelas do motor

O trem de manivelas é modelado pelo bloco *EngCrankTrain*, o qual resolve os fenômenos dinâmicos e cinemáticos dos corpos rígidos envolvidos em configurações típicas de motores alternativos. É realizado um cálculo do torque resultante do sistema pistão, biela e árvore de manivelas, assim como o cálculo de inércia, aplicação de cargas externas e acoplamento de modelos de atrito.

Nesse bloco foi definido o tipo de motor alternativo como de quatro tempos e a especificação da simulação em função da rotação, resultando em uma carga

calculada. Além disso, foi especificado o ângulo de virabrequim como início da simulação na abertura da válvula de admissão, como sugerido pelo *software*.

É utilizado nesse bloco um modelo para calcular o atrito no motor fundamentado na correlação de Chen-Flynn, que realiza o cálculo de atrito em função do pico de pressão no cilindro, da velocidade média do pistão e da velocidade média quadrática do pistão. Contudo, neste trabalho foi utilizada a pressão média efetiva de atrito - FMEP, fornecida experimentalmente, que dispensa a utilização das variáveis mencionadas acima. São definidos, ainda nesse bloco, os dados geométricos do motor e as condições iniciais para o cálculo da eficiência volumétrica.

3.2.4.6. Caracterização do cilindro

No bloco utilizado para a caracterização do cilindro, denominado *EngCylinder*, são definidas as condições iniciais para o fluido, como a temperatura do cabeçote, do pistão e do cilindro, o modelo para cálculo do coeficiente convectivo de transferência de calor, o modelo de combustão e o cálculo reverso da fração de massa queimada mediante análise das curvas de pressão.

Para as condições de inicialização do fluido, foram inseridos para cada caso os valores de pressão correspondentes ao fechamento da válvula de admissão, ângulo no qual se inicia a simulação. Para a temperatura, um valor médio estimado e um objeto de referência foram atribuídos da biblioteca do *software* para representar a carga de ar admitida.

No modelo para o cálculo de temperatura da parede foi utilizado o *EngCylTWallSoln*, no qual foram definidas geometrias adicionais medidas com o auxílio do *software* SpaceClaim® e inseridas as temperaturas dos fluidos de arrefecimento, que foram iguais a 363 K.

Para o cálculo do coeficiente convectivo de transferência de calor foi escolhido o modelo *WoschniGT*. Utilizando o *software* SpaceClaim® foram calculadas as razões da área do cabeçote em relação ao diâmetro do cilindro e da área do pistão em relação ao diâmetro do cilindro. Para cada caso simulado foi ajustado empiricamente um valor do multiplicador do coeficiente convectivo de transferência de calor.

3.3. Análise da Detonação

Neste trabalho foi desenvolvida uma metodologia para a análise da detonação que consiste na avaliação da sensibilidade do modelo fenomenológico utilizado, denominado Douaud & Eyzat. Em relação à detecção numérica do fenômeno induzido experimentalmente, foi adotado uma metodologia que consiste em integrar o tempo de indução da detonação (KITI), que compreende o período desde o início da simulação, correspondente ao fechamento da válvula de admissão até o instante em que começar ocorrer à detonação, conforme pode ser verificado através das Equações 19 e 20. O modelo de detonação utiliza dados referentes ao Número de Octanos dos combustíveis e mistura para correlacionar ao início da ocorrência do fenômeno.

Além disso, para condições experimentais aquisitadas apenas em *MBT* (*Maximum Brake Torque*), foi desenvolvido um modelo preditivo de combustão visando à exploração numérica da condição de detonação. Sendo assim, são apresentadas nesse tópico as condições de operação experimentais escolhidas, assim como os modelos de combustão adotados e procedimento de calibração efetuado no modelo preditivo de combustão. Foi adotado o mesmo modelo fenomenológico de detonação para todos os modelos de combustão utilizados. Para esse trabalho a combustão foi abordada de duas formas distintas: através da análise prescritiva que utiliza a fração de massa queimada imposta no modelo, ou seja, como condição de entrada, obtida da curva de pressão experimental e, sobretudo, por meio de uma análise mais complexa denominada preditiva em que a fração de massa queimada constitui um parâmetro de saída ou um resultado da simulação.

3.3.1. Condições de operação escolhidas

O objetivo principal deste trabalho é realizar uma análise numérica unidimensional do fenômeno da detonação em motores de combustão interna, sobretudo por meio do desenvolvimento e validação de um modelo preditivo de combustão, adotando o modelo prescritivo como suporte.

Sendo assim, foram escolhidos casos experimentais nos quais haviam condições disponíveis em *MBT* e com detonação. Esses casos foram numericamente validados em relação aos dados experimentais e utilizados na

avaliação do modelo de detonação disponível no software GT-SUITE[®], denominado Douaud & Eyzat, visando que ele detecte a detonação numericamente apenas nos casos em que ela ocorreu experimentalmente.

Julgou-se necessária a aplicação dessa metodologia para analisar a sensibilidade do modelo e certificar que o fenômeno seria corretamente detectado. Na Tabela 3 são apresentados os casos operando no *MBT* e na Tabela 4 os casos que atingiram a condição de detonação induzida experimentalmente.

Tabela 3 – Dados experimentais no *MBT* utilizados para a validação do modelo de combustão.

Item	Caso 1	Caso 2	Caso 3
BMEP [bar]	6	6	6
Rotação [rpm]	3000	3000	3000
Combustível	E0	E10	E22
Razão de equivalência estequiométrica	1	1	1
Temperatura média na Admissão [K]	299,81	302,79	301,73
Temperatura média na Exaustão [K]	974,96	969,60	972,72
Massa de combustível injetada [mg/ciclo]	22,94	24,09	23,58
Vazão mássica de ar [kg/h]	30,5	30,13	27,32
Início da injeção [°]	-280	-270	-270
Duração da injeção [ms]	1,73	1,81	1,88
Avanço de ignição - APMS [°]	18,50	19,50	19,50

Fonte: Adaptado da equipe experimental CTM-UFGM, 2017.

Tabela 4 – Dados experimentais operando com detonação induzida para a validação do modelo de detonação.

Item	Caso 4	Case 5	Caso 6
BMEP [bar]	6	6	6
Rotação [rpm]	3000	3000	3000
Combustível	E0	E10	E22
Razão de equivalência estequiométrica	1	1	1
Temperatura média na Admissão [K]	299,91	302,70	301,60
Temperatura média na Exaustão [K]	966,78	957,67	953,39
Massa de combustível injetada [mg/ciclo]	22,25	23,07	23,63
Vazão mássica de ar [kg/h]	29,52	28,92	27,48
Início da injeção [°]	-280	-270	-270
Duração da injeção [ms]	1,73	1,82	1,89
Avanço de ignição - APMS [°]	20,50	22,50	24,50

Fonte: Adaptado da equipe experimental CTM-UFMG, 2017.

Para condições operando com gasolina misturada a altos teores de etanol, assim como para o etanol hidratado, foram escolhidos casos nos quais não haviam dados disponíveis com detonação.

Muitas vezes a exploração desse fenômeno é limitada à capacidade estrutural do motor em estudo. Sendo assim, por intermédio da calibração do modelo preditivo de combustão, é possível extrapolar numericamente as condições experimentais e induzir a detonação através da variação numérica do avanço de ignição. Os casos utilizados para esse estudo são descritos na Tabela 5.

Tabela 5 – Dados experimentais em *MBT* utilizados na calibração do modelo de combustão preditiva e indução numérica da detonação.

Item	Caso 7	Case 8	Caso 9
BMEP [bar]	8	8	8
Rotação [rpm]	2000	2000	2000
Combustível	E27	E85	E100
Razão de equivalência estequiométrica	1	1	1
Temperatura média na Admissão [K]	302,28	300,22	308,15
Temperatura média na Exaustão [K]	897,62	881,25	876,81
Massa de combustível injetada [mg/ciclo]	31,04	38,29	41,49
Vazão mássica de ar [kg/h]	23,19	21,36	22,00
Início da injeção [°]	-270,00	-300,00	-299,00
Duração da injeção [ms]	2,33	2,92	3,20
Avanço de ignição - APMS [°]	16,50	21,50	21,00

Fonte: Adaptado da equipe experimental CTM-UFGM, 2017.

3.3.2. Modelo Não-Preditivo

O modelo de combustão não-preditivo ou prescritivo utiliza a função de Wiebe, apresentada pela Equação 10, para a imposição da fração de massa queimada. Esse modelo possui uma metodologia simples para análise da combustão.

Sendo assim, esse modelo é muito importante para a calibração dos orifícios de entrada e saída do modelo, objetivando uma boa correlação da pressão experimental e numérica nos sistemas de admissão e exaustão, já que os dados de entrada inseridos nos blocos da fronteira do domínio são médios. Além disso, é imprescindível a validação numérica com os dados experimentais, a fim de verificar-se a qualidade do modelo criado, visto que o mesmo domínio será utilizado para a calibração da combustão preditiva.

O modelo prescritivo constitui uma forma numérica de análise de dados experimentais satisfatória e trivial, se comparado à elaboração de um modelo

preditivo de combustão, quando o objetivo é a obtenção de condições de contorno mais simples, como a temperatura de parede nos dutos e no cilindro para modelos multidimensionais. Neste trabalho o modelo prescritivo foi utilizado na avaliação do modelo de detonação adotando os casos apresentados na Tabela 3 e na Tabela 4.

3.3.3. Calibração do modelo preditivo de combustão

A calibração do modelo preditivo de combustão foi realizada para os casos descritos na Tabela 5. Inicialmente, o modelo não-preditivo foi utilizado para obtenção das seguintes condições iniciais:

- Condições de inicialização no cilindro para calibração dos parâmetros de combustão:
 - ✓ Eficiência Volumétrica;
 - ✓ Massa de combustível aprisionada;
 - ✓ Fração de combustível evaporado;
 - ✓ Fração de massa queimada residual;
 - ✓ Propriedades de ar;
 - ✓ Propriedades do combustível;
- Dados de turbulência calculados pelo modelo:
 - ✓ Número de tumble;
 - ✓ Número de swirl;
 - ✓ Intensidade Turbulenta;
 - ✓ Comprimento de escala turbulenta.

Posteriormente, foi definido o modelo *Measured + Predicted*, que do inglês significa medido + preditivo. Esse modelo apresenta uma interface cujo objetivo é facilitar a calibração dos parâmetros de combustão do modelo preditivo SITurb. Ou seja, além das condições de inicialização do cilindro e dos dados de turbulência mencionados anteriormente, é definido o modelo de combustão preditiva em conjunto com o modelo de combustão utilizado na análise *TPA*, no qual a pressão experimental por ângulo de virabrequim é imposta para o cálculo da fração de massa queimada e pressão no cilindro. Sendo assim, são executados dois ciclos na simulação e, como resultado, são geradas três curvas: a experimental, a obtida pela fração de massa queimada e a preditiva.

As duas curvas geradas (a experimental e a obtida da fração de massa queimada) servem de parâmetro para calibração da combustão preditiva, pois esse modelo, uma vez calibrado, dispensa condições experimentais para o cálculo da combustão. Por essa razão que esse modelo é tão útil na extrapolação de condições difíceis ou impossíveis de serem obtidas experimentalmente.

A calibração é realizada utilizando quatro parâmetros de acordo com Gervásio (2017), sendo eles:

- *Turbulent flame speed multiplier* – *TFSM*, que do inglês significa multiplicador da velocidade de chama turbulenta, ou seja, constitui um fator de multiplicação da velocidade de chama turbulenta calculada. Esse fator influencia na velocidade de queima e, conseqüentemente, na duração da combustão, sendo que quanto maior é esse fator, maior será a velocidade da queima.
- *Taylor length scale multiplier* – *TLSM*, do inglês significa multiplicador do comprimento de escala de Taylor, e constitui um fator de multiplicação da microescala de Taylor, apresentado pela Equação 16. Conforme é descrito por essa equação, a microescala de Taylor influencia no tempo característico da taxa de queima da mistura ar/combustível não queimada arrastada para a frente de chama.
- *Flame Kernel Growth Multiplier* – *FKGM*, do inglês significa multiplicador do crescimento da chama. Esse parâmetro tem influência no período entre a centelha e o início da combustão, no qual o percentual de fração de massa queimada está entre 0 a 10%. O aumento desse multiplicador influenciará na diminuição desse período.
- *Dilution Exponent Multiplier* – *DEM*, do inglês significa multiplicador do expoente de diluição, ou seja, esse parâmetro está relacionado ao efeito da diluição da fração de massa residual retida no cilindro na velocidade laminar de chama. Portanto, quanto maior o valor desse multiplicador, menor será seu efeito na velocidade laminar de chama e, conseqüentemente, maior será a taxa de queima.

Para o cálculo da velocidade laminar de chama executado pelo modelo SITurb, apresentado pelas Equações 17 e 18. Esse modelo dispõe de variáveis predefinidas para alguns combustíveis, como gasolina e o etanol. Contudo, no caso

deste trabalho, como apresentado na Tabela 5, os casos 4 e 5 foram aquisitados operando com misturas de gasolina e etanol, portanto as variáveis para o cálculo da velocidade laminar de chama foram obtidas através de uma média ponderada da fração de cada combustível na mistura. Os valores dessas constantes obtidas para o cálculo da velocidade laminar de chama para a gasolina, o etanol, o E27 e o E85 são indicados na Tabela 6.

Tabela 6 – Constantes do Cálculo da Velocidade Laminar de Chama

Constantes	Gasolina	E100	E27	E85
B_m	0,350	0,452	0,380	0,436
B_ϕ	-0,549	-1,639	-0,865	-1,465
ϕ_m	1,1	1,091	1,097	1,092
a	$2,4 - 0,271 \phi^{3,51}$	$2,18 - 0,8(\phi - 1)$	2,144	2,172
β	$2,4 - 0,271 \phi^{3,51}$	$-16+0,22(\phi - 1)$	-0,2	0,169

Fonte: Elaborada pelo Autor

A calibração do modelo preditivo de combustão SITurb tem como principal objetivo obter valores para os parâmetros de combustão *TFSM*, *TLSM*, *FKGM* e *DEM*, de forma a possibilitar a melhor correlação possível entre os dados preditivos e o experimento.

Essa calibração pode ser realizada baseada na correlação de vários resultados numéricos e experimentais, como a taxa de queima, IMEP e pressão no cilindro. Para este trabalho optou-se por utilizar a taxa de queima como parâmetro de correlação para a calibração entre os dados medidos e simulados.

Uma maneira eficiente de realizar essa calibração dos parâmetros da combustão por meio da correlação da taxa de queima é utilizando-se um algoritmo de otimização disponível no software GT-SUITE®, como apresentado pelas Figura 12, Figura 13 e Figura 14, nas quais é demonstrada a otimização dos parâmetros de combustão em função do número de iterações.

Esse algoritmo faz uma varredura dos valores dos parâmetros de combustão do modelo SITurb em uma faixa preestabelecida, buscando minimizar o erro entre a taxa de queima preditiva e experimental. O algoritmo calcula a quantidade de

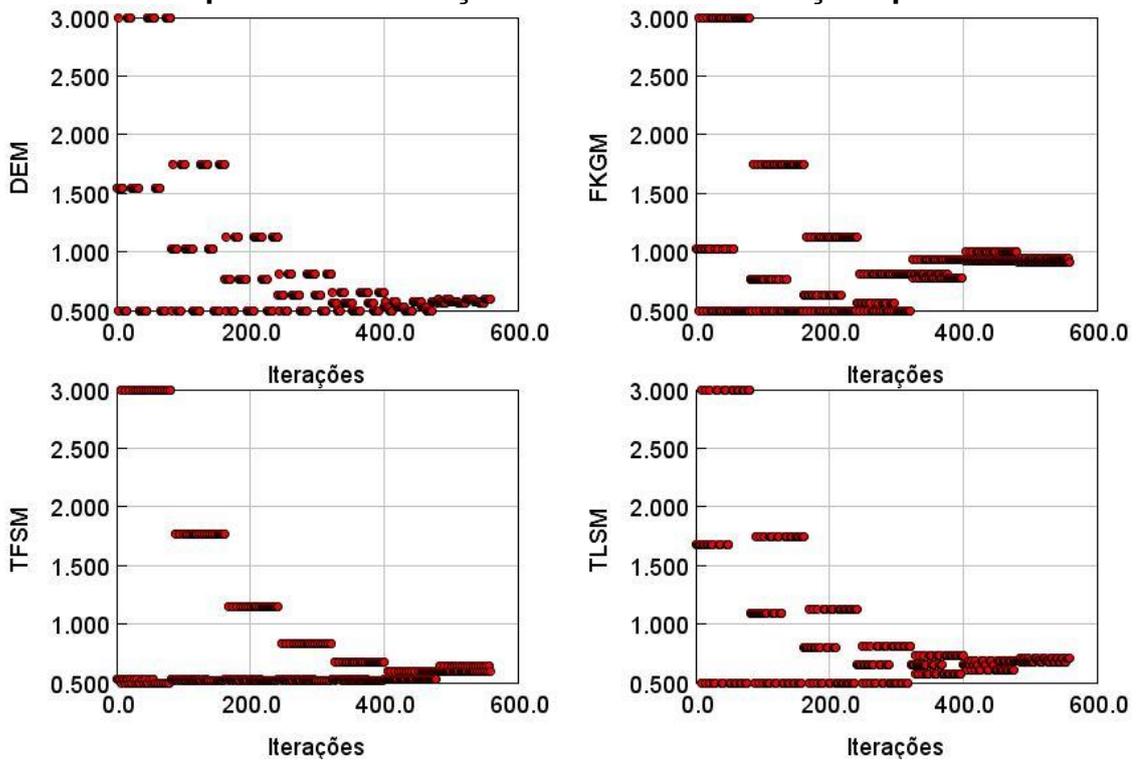
iterações necessárias para convergência da simulação de acordo com a quantidade de variáveis a serem otimizadas. Para esse trabalho foram necessárias em torno de 500 iterações para a otimização dos quatro parâmetros de combustão do modelo SITurb. A faixa dos valores mínima e máxima inseridos no algoritmo para a otimização dos parâmetros de combustão oscilaram entre 0,5 e 3. Os valores otimizados para os casos 7, 8 e 9, apresentados na Tabela 5, são mostrados na Tabela 7.

Tabela 7 – Parâmetros de calibração otimizados para o modelo preditivo de combustão

Parâmetros de calibração	Caso 7	Caso 8	Caso 9
<i>TFSM</i>	0,60046387	0,50146484	0,50302124
<i>TLSM</i>	0,7090454	3	2,2804565
<i>FKGM</i>	0,9110184	1,703125	1,5151186
<i>DEM</i>	0,60097504	0,55	1,0401802

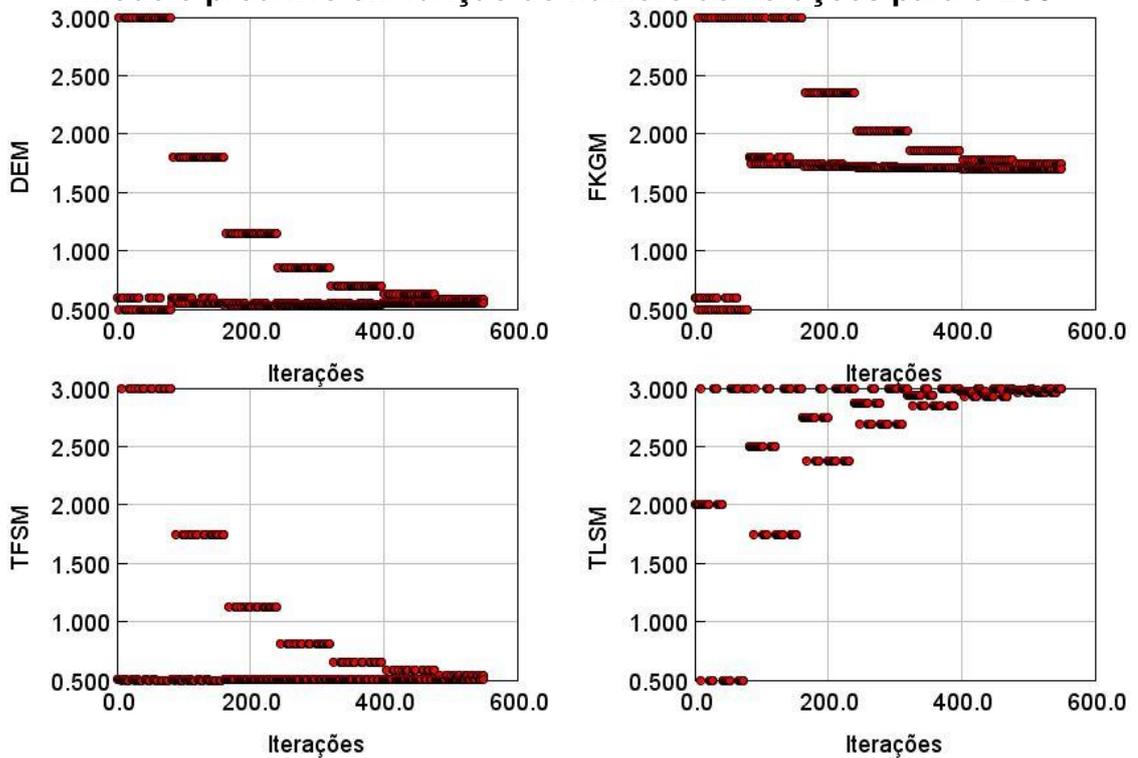
Fonte: Elaborada pelo Autor

Figura 12 – Resultados da otimização dos parâmetros de combustão do modelo preditivo em função do número de iterações para o E27



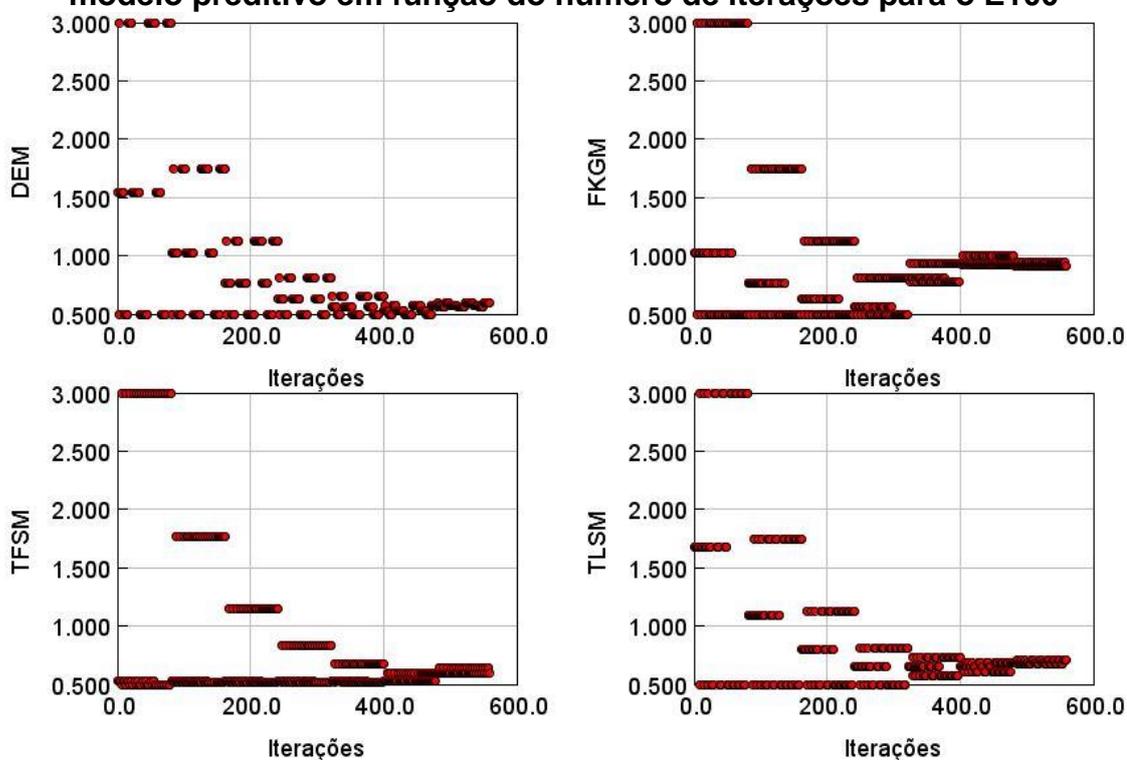
Fonte: Elaborada pelo Autor

Figura 13 – Resultados da otimização dos parâmetros de combustão do modelo preditivo em função do número de iterações para o E85



Fonte: Elaborada pelo Autor

Figura 14 – Resultados da otimização dos parâmetros de combustão do modelo preditivo em função do número de iterações para o E100



Fonte: Elaborada pelo Autor

O modelo de combustão preditiva SITurb, descrito no subtópico 2.2.7, após a obtenção dos valores dos parâmetros de combustão otimizados através do modelo *measured + predicted*, é implementado no mesmo domínio onde foram validados os casos utilizando o modelo Wiebe de combustão.

Sendo assim, a simulação é executada a fim de se verificar se o processo de otimização foi executado com êxito. Uma vez que o modelo preditivo esteja calibrado com os experimentais, a ferramenta poderá ser utilizada para a exploração e extrapolação de condições que não foram obtidas experimentalmente.

3.4. Critérios adotados para a validação dos modelos de combustão e detonação em relação aos dados experimentais

A validação dos modelos de combustão e detonação em relação aos dados obtidos experimentalmente foi realizada da seguinte forma: além dos parâmetros utilizados pela solução do *software* para a convergência, como o fluxo de massa, a pressão e a temperatura em cada componente do modelo corresponde ao domínio

do motor, mais quatro parâmetros foram utilizados como critério de convergência, impondo uma tolerância de no máximo 5% de divergência numérica e experimental para todos os casos simulados neste trabalho.

Os critérios adicionais adotados para a convergência são: o IMEP, a pressão máxima no cilindro, a vazão mássica de ar e a vazão mássica de combustível. Os resultados alcançados são apresentados no próximo capítulo nas Tabela 8, Tabela 9 e Tabela 10.

A validação da combustão também foi realizada de forma qualitativa através da comparação gráfica numérica e experimental da pressão no cilindro por ângulo de virabrequim e do diagrama LogP-LogV, no qual as principais divergências foram ressaltadas e comentadas. A análise cíclica em escala logarítmica foi de suma importância na identificação de eventos que não foram possíveis de serem visualizados nos gráficos da pressão no cilindro em função do ângulo de virabrequim. Muitos casos apresentaram divergências comuns, como no pico de pressão, evento de injeção e o período correspondente ao tempo da exaustão. Essas diferenças são discutidas no capítulo 4, referentes aos resultados e discussões.

Com relação à validação da detonação, foi adotada a metodologia KITI que consiste em integrar o fator correspondente ao tempo de indução da detonação desde o início da simulação, no instante de abertura da válvula de admissão até o instante de ocorrência da detonação. Sendo assim, quando o valor da integral adotada pelo modelo fenomenológico de detonação acoplado ao modelo de combustão for igual ou superior a 1 constitui um indicativo de ocorrência da detonação.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesse capítulo são apresentados os resultados referentes à validação numérica em relação aos dados experimentais e os resultados da análise da detonação. Para a validação, as diferenças percentuais para quatro parâmetros foram tabeladas para todos os casos, além disso, foram realizadas análises gráficas de pressão no cilindro por ângulo de virabrequim e LogP-LogV, devido ao fato da análise logarítmica permitir uma visualização mais detalhada da correlação entre os resultados numéricos e os adquiridos experimentalmente.

Na análise da detonação o modelo Douaud & Eyzat foi utilizado para a detecção numérica do fenômeno em casos experimentais operando em início de detonação e no *MBT*. Para a verificação da ocorrência da detonação foi utilizada a metodologia KITI, apresentado no tópico 2.2.8. Verificando-se que o modelo Douaud & Eyzat atendeu às expectativas, o mesmo foi implementado no modelo preditivo de combustão para condições de operação em *MBT*, objetivando alcançar numericamente a detonação através da alteração numérica do avanço de ignição. Para esse trabalho é importante ressaltar que, como os dados experimentais aquisitados representam uma média de 200 ciclos, a oscilação nos gráficos da pressão no cilindro por ângulo de virabrequim próximo ao pico de pressão, nos casos em que ocorreu detonação, não se apresenta visível.

4.1. Validação da combustão

Os resultados contendo as diferenças percentuais numéricas e experimentais para os parâmetros, como IMEP, pressão de pico no cilindro, massa de ar e massa de combustível para os casos apresentados nas Tabela 3, Tabela 4 e Tabela 5 são apresentados nas Tabela 8, Tabela 9 e Tabela 10. Já os resultados gráficos da correlação da pressão no cilindro e LogP-LogV numérica e experimental são apresentados da Figura 15 à Figura 32.

Tabela 8 – Diferença percentual entre os resultados numéricos e experimentais dos casos operando MBT.

Item	Caso 1 [%]	Caso 2 [%]	Caso 3 [%]
IMEP [bar]	4,50	3,92	1,60
Pressão de pico no cilindro [bar]	3,20	4,92	3,94
Massa de ar [mg/ciclo]	4,92	4,95	4,16
Massa de combustível [mg/ciclo]	2,18	1,63	2,13

Fonte: Elaborada pelo Autor

Tabela 9 – Diferença percentual entre os resultados numéricos e experimentais dos casos operando com detonação induzida experimentalmente.

Item	Caso 4 [%]	Caso 5 [%]	Caso 6 [%]
IMEP [bar]	4,41	2,87	1,98
Pressão de pico no cilindro [bar]	2,38	4,42	3,78
Massa de ar [mg/ciclo]	4,76	4,78	3,21
Massa de combustível [mg/ciclo]	4,40	4,24	1,93

Fonte: Elaborada pelo Autor

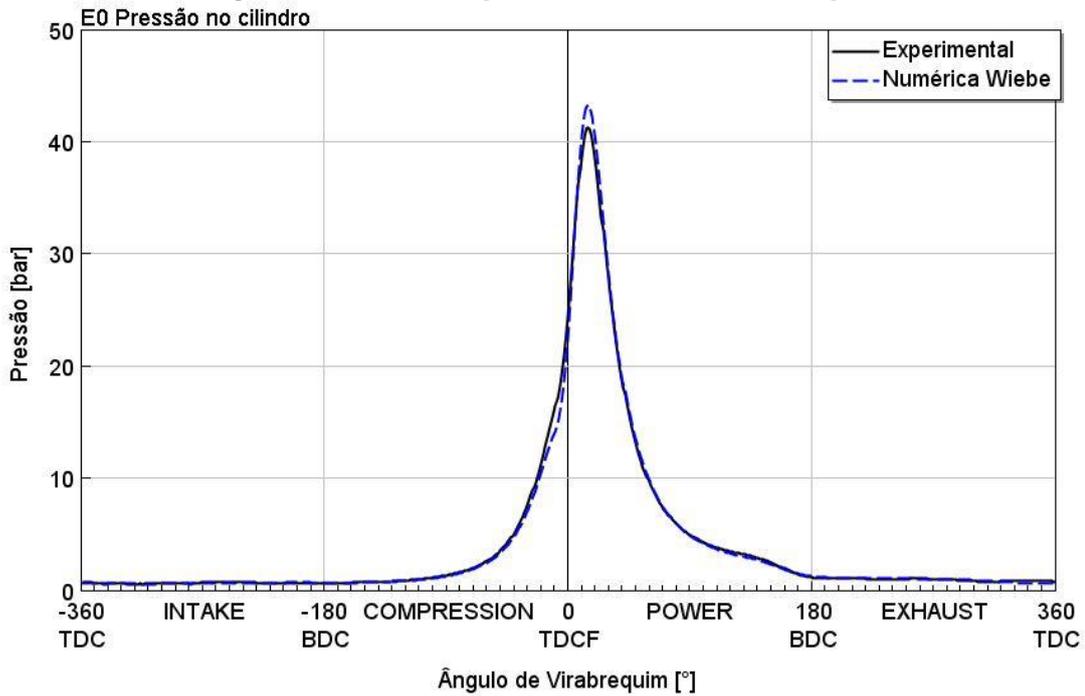
Tabela 10 – Diferença percentual entre os resultados numéricos e experimentais para os casos operando com MBT utilizados no modelo preditivo de combustão para a indução numérica da detonação.

Item	Caso 7 [%]	Caso 8 [%]	Caso 9 [%]
IMEP [bar]	1,52	1,49	1,11
Pressão de pico no cilindro [bar]	0,39	4,69	0,37
Massa de ar [mg/ciclo]	2,04	2,49	2,91
Massa de combustível [mg/ciclo]	4,96	3,37	3,59

Fonte: Elaborada pelo Autor

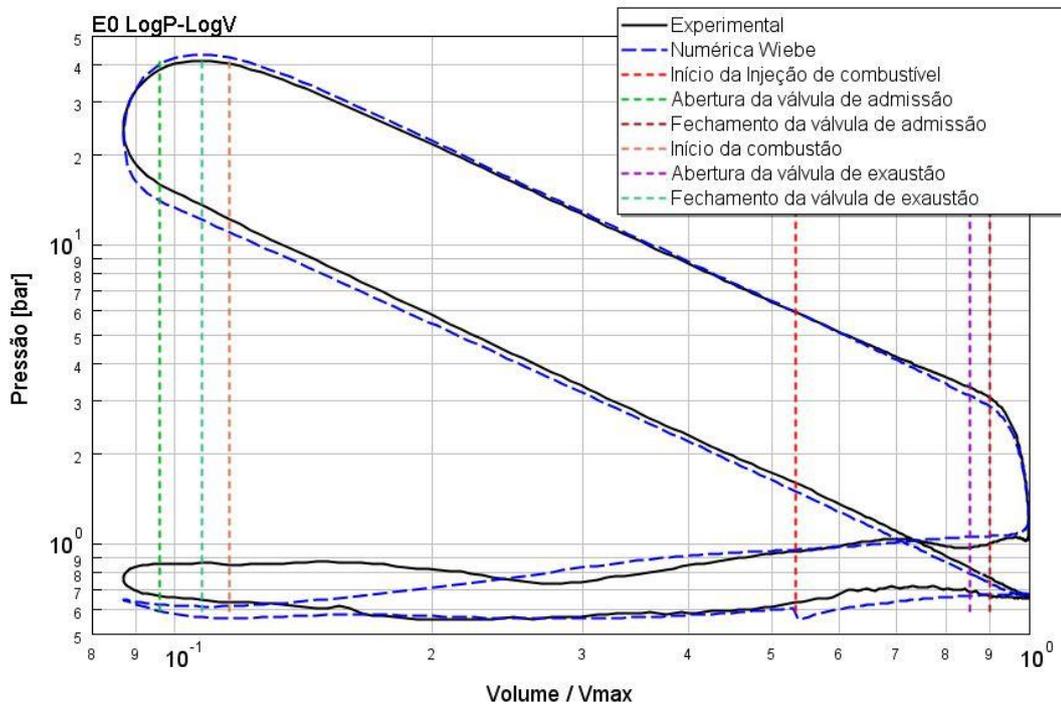
Observa-se que todos os casos escolhidos nesse trabalho para a análise da detonação apresentaram uma correlação numérica e experimental satisfatória, indicando diferenças percentuais inferiores a 5% para o IMEP, pressão de pico no cilindro, massa de ar e massa de combustível.

Figura 15 – Correlação da curva de pressão numérica e experimental do caso 1



Fonte: Elaborada pelo Autor

Figura 16 – Correlação do gráfico LogP-LogV numérico e experimental do caso 1



Fonte: Elaborada pelo Autor

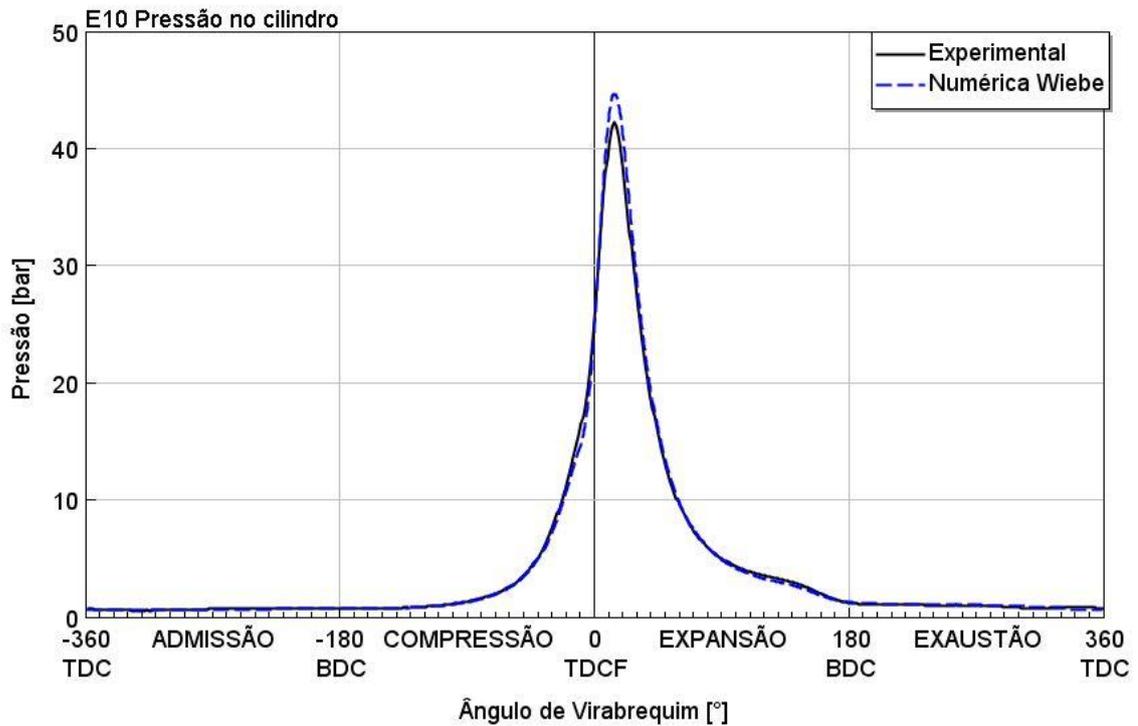
Em relação à validação da combustão no caso 1, que foi adquirido no *MBT* com rotação de 2000rpm, 6bar de BMEP e operando com E0, foram comparados os

gráficos experimentais e numéricos da pressão no cilindro em função do ângulo de virabrequim e LogP-LogV.

Para a pressão no cilindro, de uma forma geral, observa-se uma boa correlação entre o resultado simulado e o obtido experimentalmente. Contudo, pode-se ressaltar algumas divergências na fase da compressão e pico de pressão no momento da combustão. Tais diferenças existentes entre os resultados numéricos e experimentais estão relacionadas à transferência de calor e a combustão, sendo assim, os modelos adotados para a reprodução desses fenômenos podem ter influência direta em tais divergências, visto que o multiplicador do coeficiente convectivo de transferência de calor do modelo de Woschni foi ajustado empiricamente e modelo de combustão utilizado para esse caso foi o modelo prescritivo, que utiliza a função de Wiebe para imposição da fração de massa queimada.

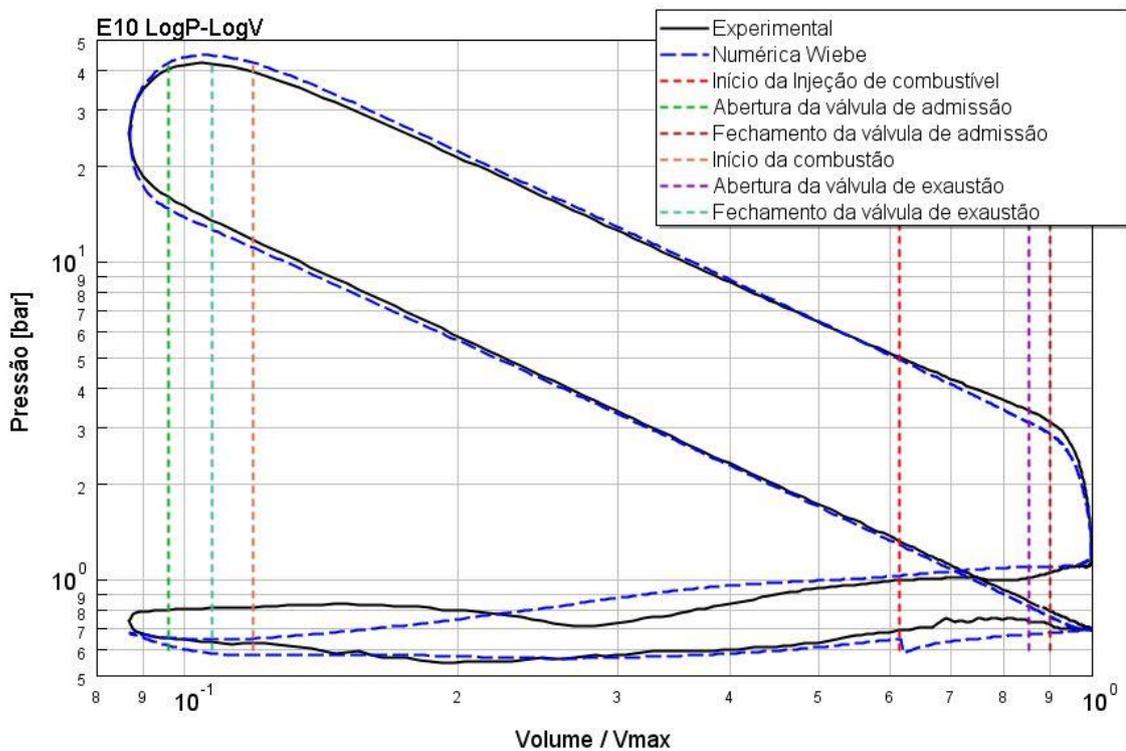
No gráfico LogP-LogV, tais divergências numéricas e experimentais observadas através da curva de pressão no cilindro ficam ainda mais evidentes. Sobretudo, somente por intermédio desse gráfico é possível a verificação de uma diferença entre o final da exaustão e o início da admissão. Essa divergência está relacionada à dificuldade de calibração dos orifícios de conexão existentes entre os dutos da admissão e exaustão. Vale ressaltar ainda uma divergência presente no momento da injeção de combustível.

Figura 17 – Correlação da curva de pressão numérica e experimental do caso 2



Fonte: Elaborada pelo Autor

Figura 18 – Correlação do gráfico LogP-LogV numérico e experimental do caso 2

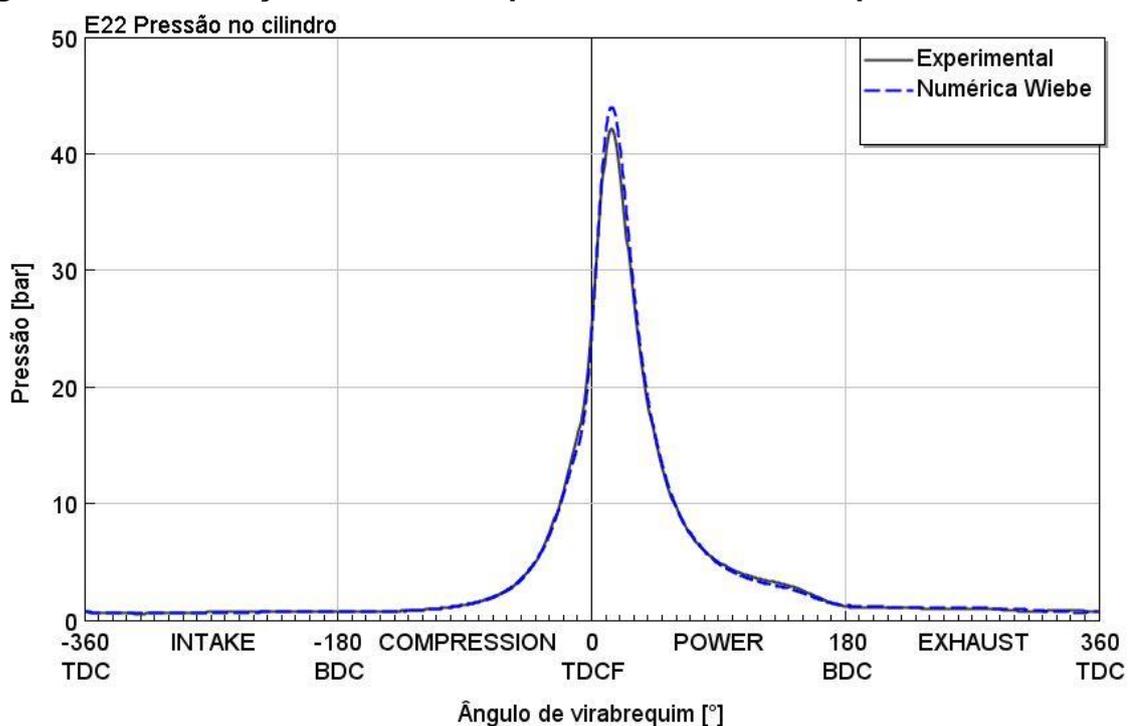


Fonte: Elaborada pelo Autor

Para a validação da combustão do caso 2, aquisitado no *MBT* com rotação de 2000 rpm, 6bar de BMEP e operando com E10, foi possível realizar ponderações por meio da comparação dos gráficos experimentais e numéricos da pressão no cilindro por ângulo de virabrequim e LogP-LogV. Para a pressão no cilindro, observa-se uma melhor correlação numérica e experimental em relação ao caso 1, principalmente na fase compressão. Contudo, no caso 2 é possível observar uma maior divergência no pico de pressão.

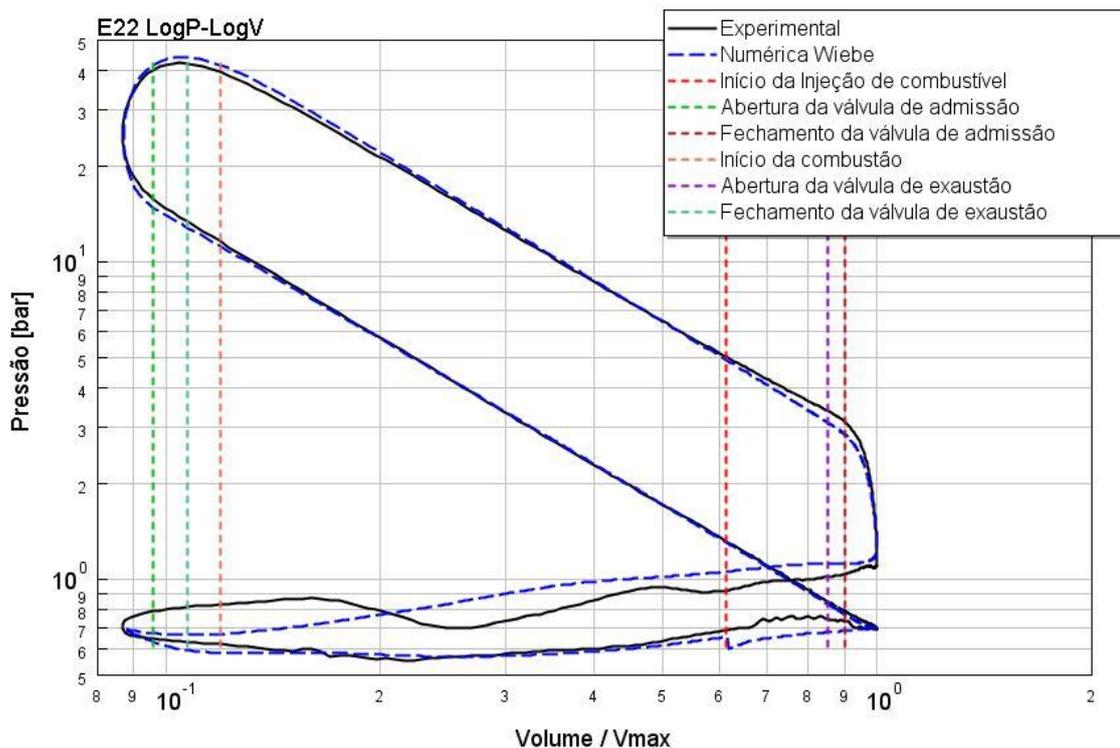
No gráfico LogP-LogV fica mais evidente essa correlação melhor entre fases da admissão e compressão. Todavia, as divergências existentes entre o final da exaustão e o início da admissão, assim como no evento da injeção de combustível, são comuns aos dois casos.

Figura 19 – Correlação da curva de pressão numérica e experimental do caso 3



Fonte: Elaborada pelo Autor

Figura 20 – Correlação do gráfico LogP-LogV numérico e experimental do caso 3

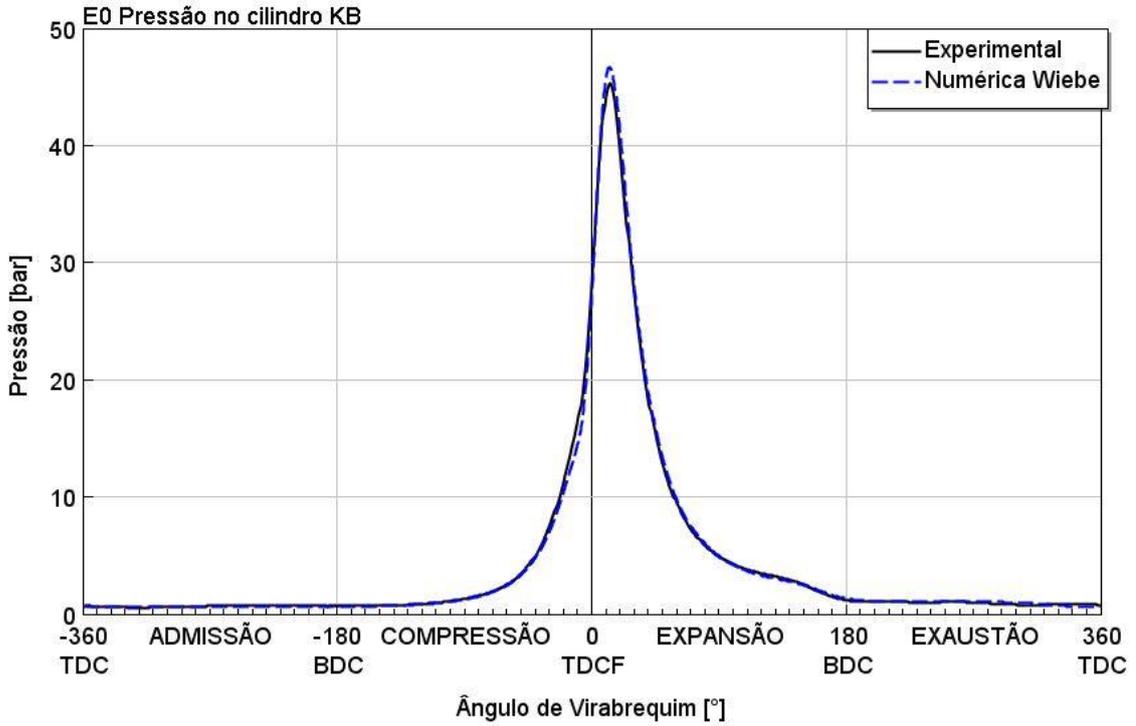


Fonte: Elaborada pelo Autor

Na validação da combustão para o caso 3, aquisitado no *MBT* com rotação de 2000 rpm, 6bar de BMEP e operando com E22, foram realizadas algumas observações mediante a análise dos gráficos experimentais e numéricos da pressão no cilindro por ângulo de virabrequim e LogP-LogV. Na Figura 19 é observada uma ótima correlação numérica e experimental da fase da compressão, principalmente se esse caso for comparado aos casos 1 e 2. Na análise da pressão no cilindro, observa-se uma melhor correlação em relação ao caso 1, principalmente na fase compressão. Entretanto, no caso 3 também existe uma divergência notável no pico de pressão, mas dentro da faixa de erro numericamente aceitável de 5%.

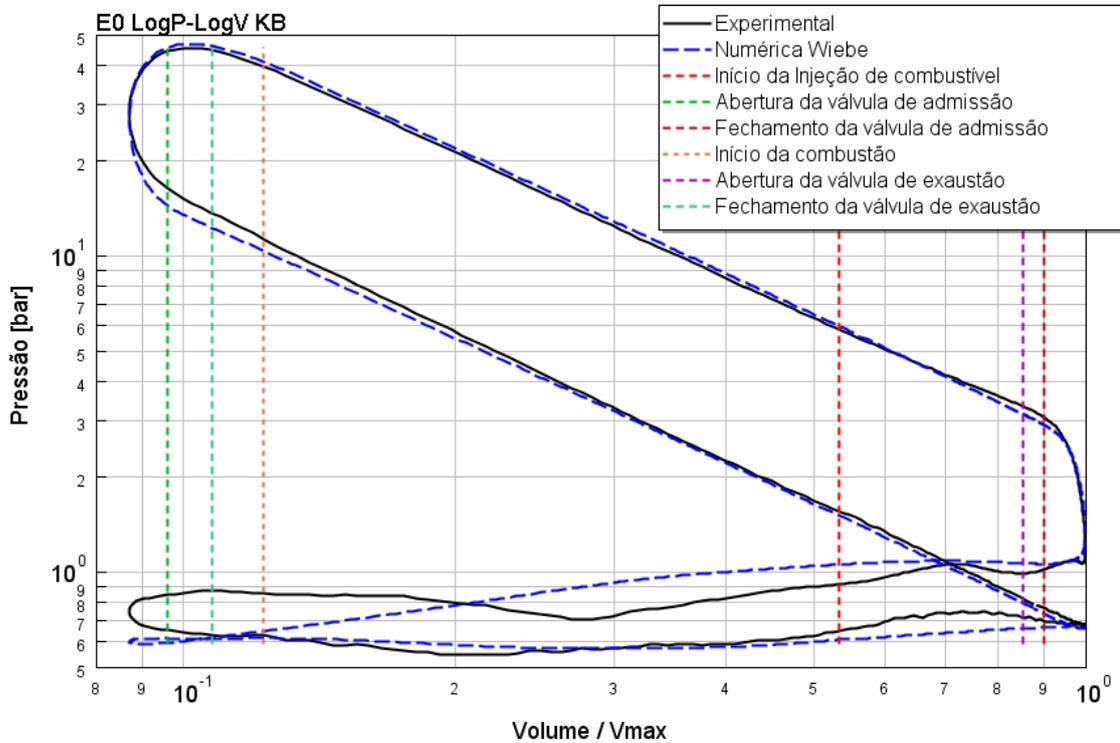
No gráfico LogP-LogV, uma melhor correlação principalmente no período da compressão fica visivelmente evidente. Além disso, no caso 3 também é possível observar as mesmas divergências existentes no evento de injeção de combustível e no período que compreende o final da exaustão e o início da admissão.

Figura 21 – Correlação da curva de pressão numérica e experimental do caso 4



Fonte: Elaborada pelo Autor

Figura 22 – Correlação do gráfico LogP-LogV numérico e experimental do caso 4



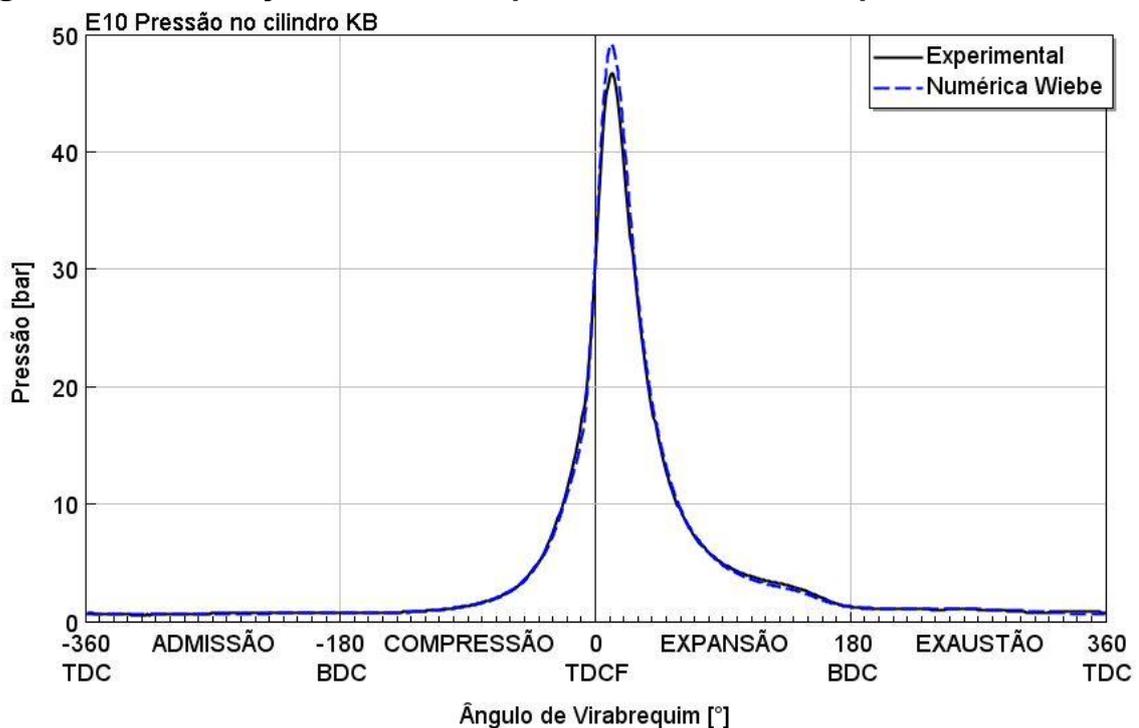
Fonte: Elaborada pelo Autor

O caso 4 foi aquirado nas condições do caso 1, com rotação de 2000rpm, 6bar de BMEP e operando com E0, porém, com avanço de ignição maior, fora do *MBT*, operando em condições de início de detonação. Sendo assim, foram comparados os gráficos experimentais e numéricos da pressão no cilindro por ângulo de virabrequim e LogP-LogV.

Na Figura 21, na qual são apresentadas a pressão no cilindro simulada e a mesma medida experimentalmente, é observada uma ótima correlação entre as curvas, principalmente se comparar-se esse caso 4 à mesma condição em *MBT* no caso 1, o qual apresentou maiores divergências no pico de pressão e na fase da compressão.

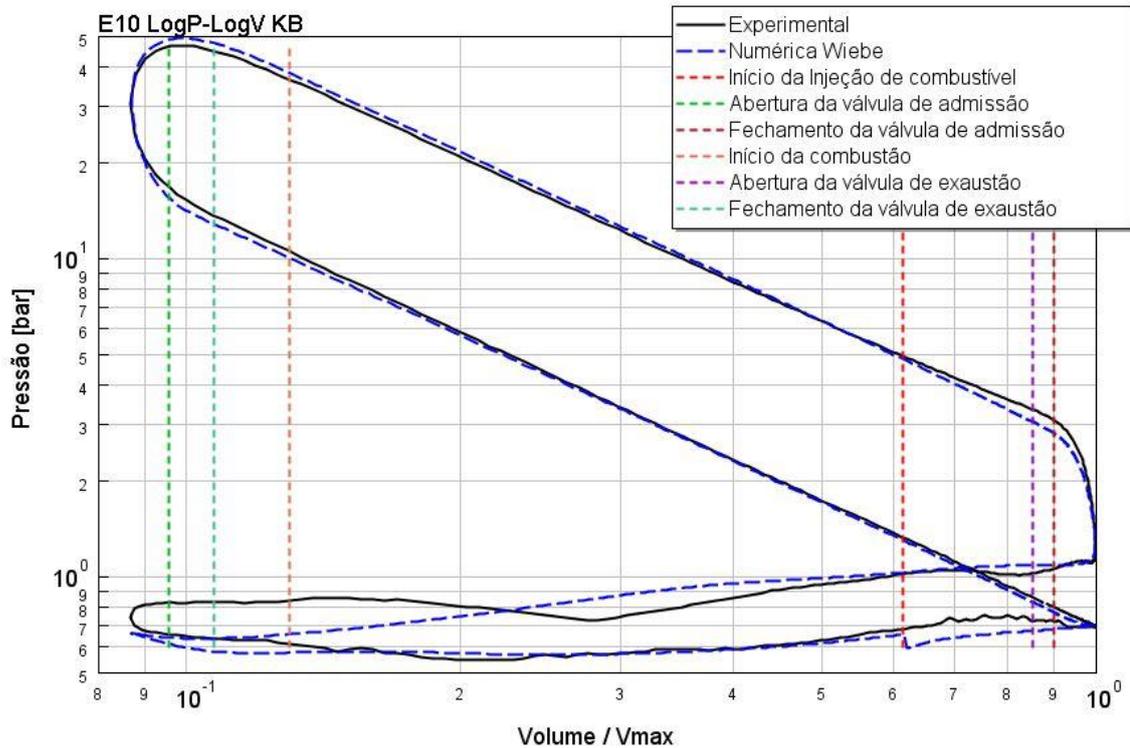
No gráfico LogP-LogV ressalta-se uma divergência maior apenas na fase da exaustão, ao contrário dos demais tempos do ciclo, nos quais pode-se verificar uma boa correlação numérica e experimental.

Figura 23 – Correlação da curva de pressão numérica e experimental do caso 5



Fonte: Elaborada pelo Autor

Figura 24 – Correlação do gráfico LogP-LogV numérico e experimental do caso 5



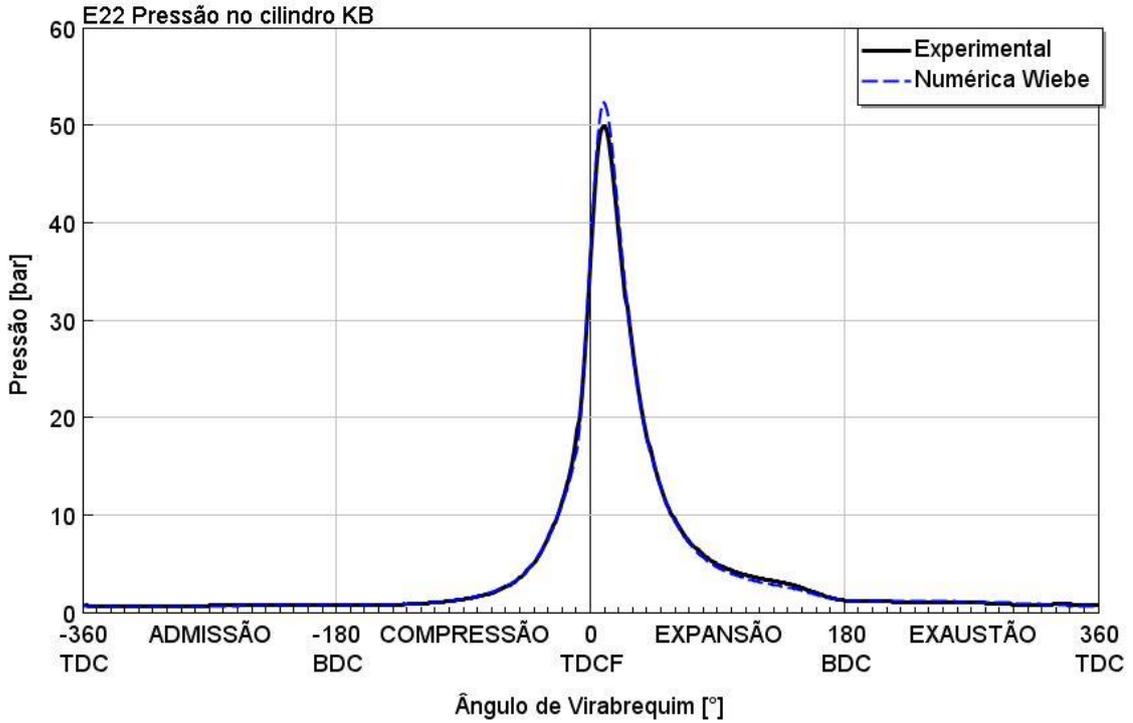
Fonte: Elaborada pelo Autor

O caso 5 foi adquirido nas condições do caso 2, com rotação de 2000rpm, 6bar de BMEP e operando com E10, porém com maior avanço de ignição, levando a condição para operação fora do *MBT* em início de detonação.

Na Figura 23 é possível observar uma ótima reprodução numérica dos dados experimentais no gráfico da pressão no cilindro em função do ângulo de virabrequim, no qual a única divergência visível está no pico de pressão.

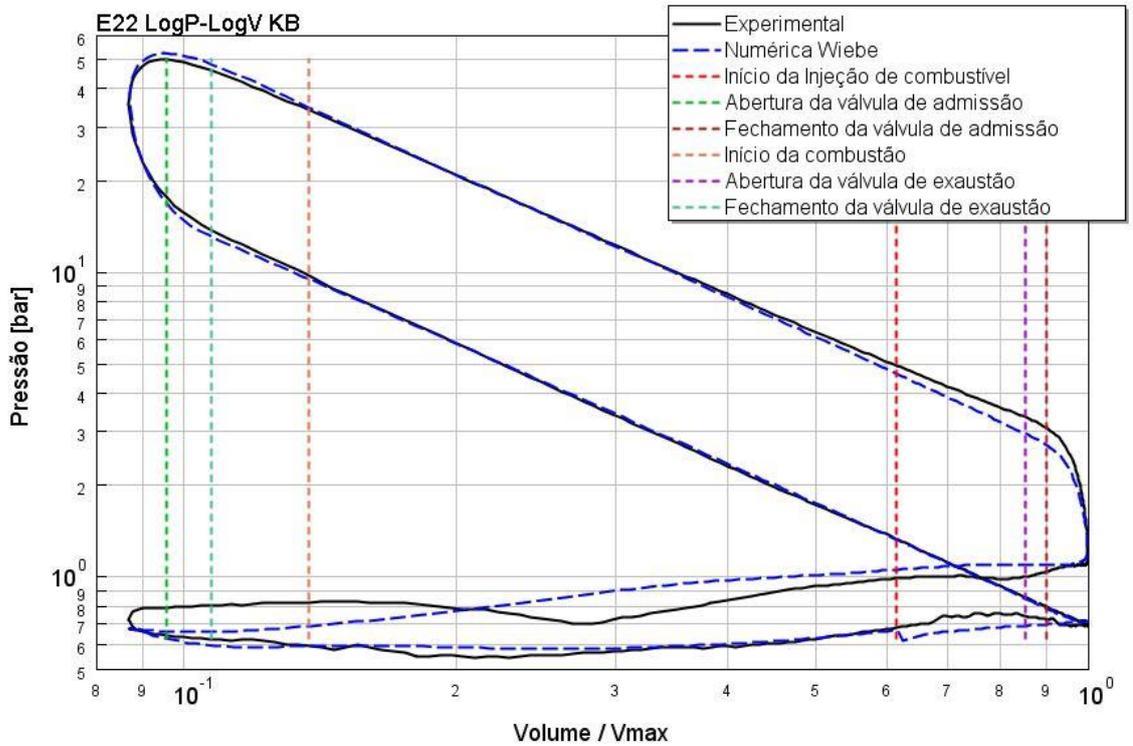
No gráfico LogP-LogV é importante observar que as curvas numéricas e experimentais se correlacionam bem em todos os tempos do ciclo, com exceção do período da exaustão e do evento da injeção de combustível.

Figura 25 – Correlação da curva de pressão numérica e experimental do caso 6



Fonte: Elaborada pelo Autor

Figura 26 – Correlação do gráfico LogP-LogV numérico e experimental do caso 6



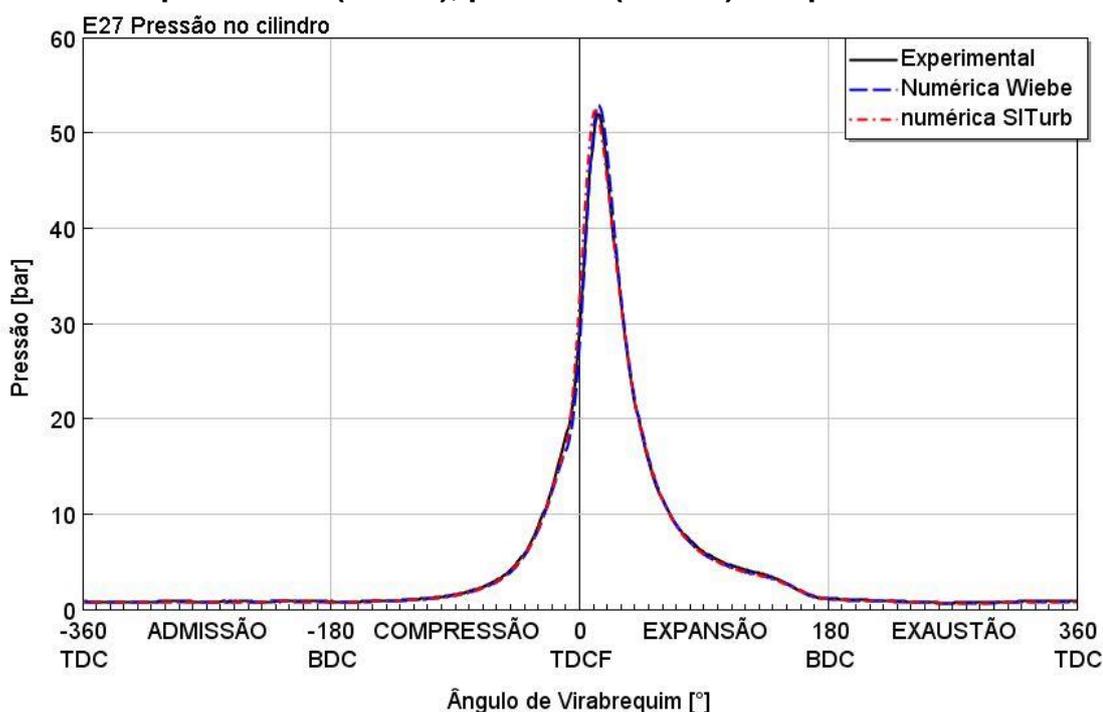
Fonte: Elaborada pelo Autor

O caso 6 foi adquirido nas condições do caso 3, com rotação de 2000 rpm, 6 bar de BMEP e operando com E22, contudo, operando em condição de detonação, alcançada através do aumento do avanço de ignição em relação ao *MBT*.

Na Figura 25, correspondente ao gráfico da pressão no cilindro em função do ângulo de virabrequim, nota-se uma divergência entre pressão numérica e experimental, comum aos casos estudados nesse trabalho, situada no pico de pressão. Tal divergência pode estar relacionada ao modelo prescritivo de combustão adotado ou ainda ao PCI fornecido para definição da mistura de combustível utilizada na simulação. Com relação aos demais períodos do ciclo, o modelo numérico correspondeu bem aos dados experimentais.

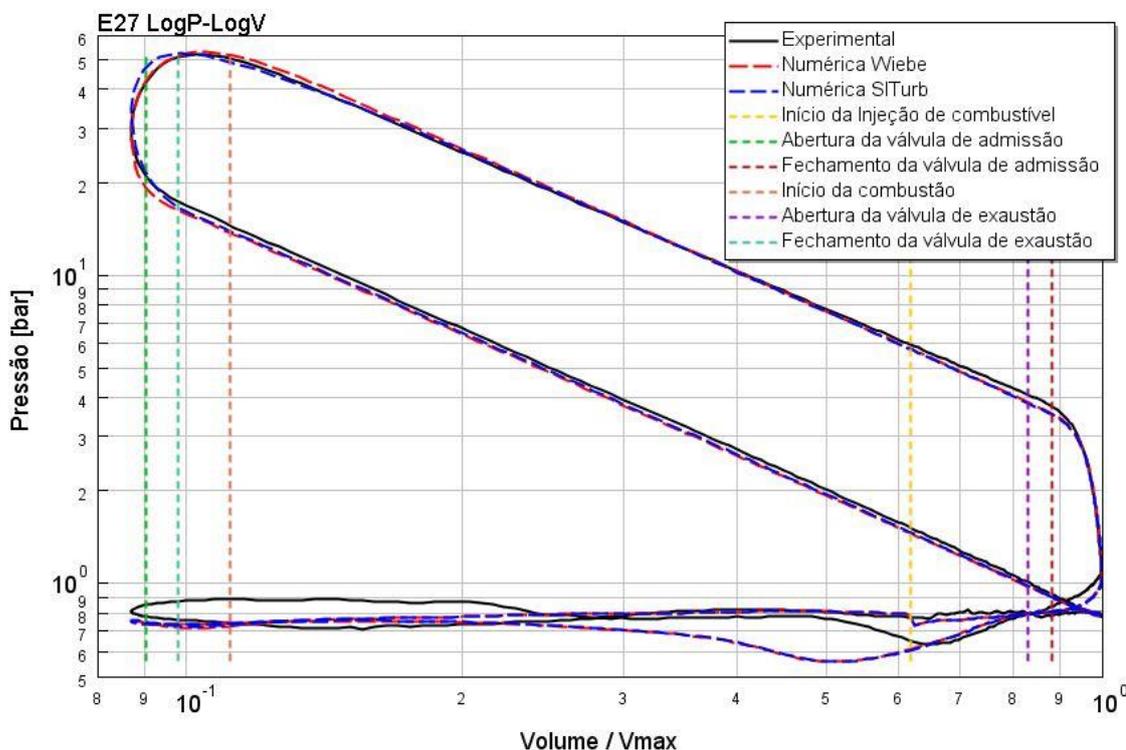
No gráfico LogP-LogV apresentado pela Figura 26, ficou evidente a correlação satisfatória entre dados da simulação numérica e dados experimentais. Todavia, é possível analisar algumas divergências específicas, como no pico de pressão, no início do *blowdown* próximo a abertura da válvula de exaustão, no período da exaustão e no evento da injeção. A identificação desse tipo de divergências mostra a importância de se realizar esse tipo de análise em escala logarítmica.

Figura 27 – Correlação das curvas de pressão numéricas dos modelos de combustão prescritivo (Wiebe), preditivo (SITurb) e experimental do caso 7



Fonte: Elaborada pelo Autor

Figura 28 – Correlação dos gráficos LogP-LogV numéricos dos modelos de combustão prescritivo (Wiebe), preditivo (SITurb) e experimental do caso 7



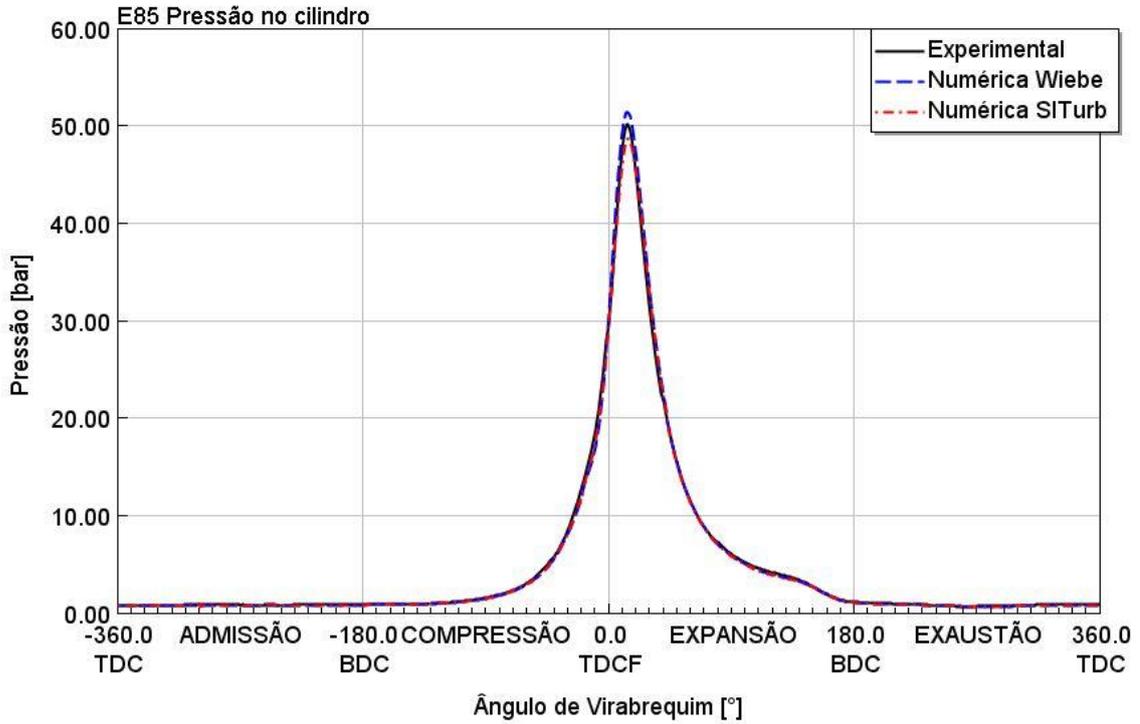
Fonte: Elaborada pelo Autor

A validação da combustão para o caso 7, que foi adquirido em *MBT*, rotação de 2000rpm, 8bar de BMEP e operando com E27, foi realizada comparando os resultados experimentais com aqueles obtidos a partir dos modelos prescritivo (Wiebe) e preditivo (SITurb).

A comparação dos resultados foi realizada por intermédio do gráfico de pressão no cilindro em função do ângulo de virabrequim e o grafico LogP-LogV.

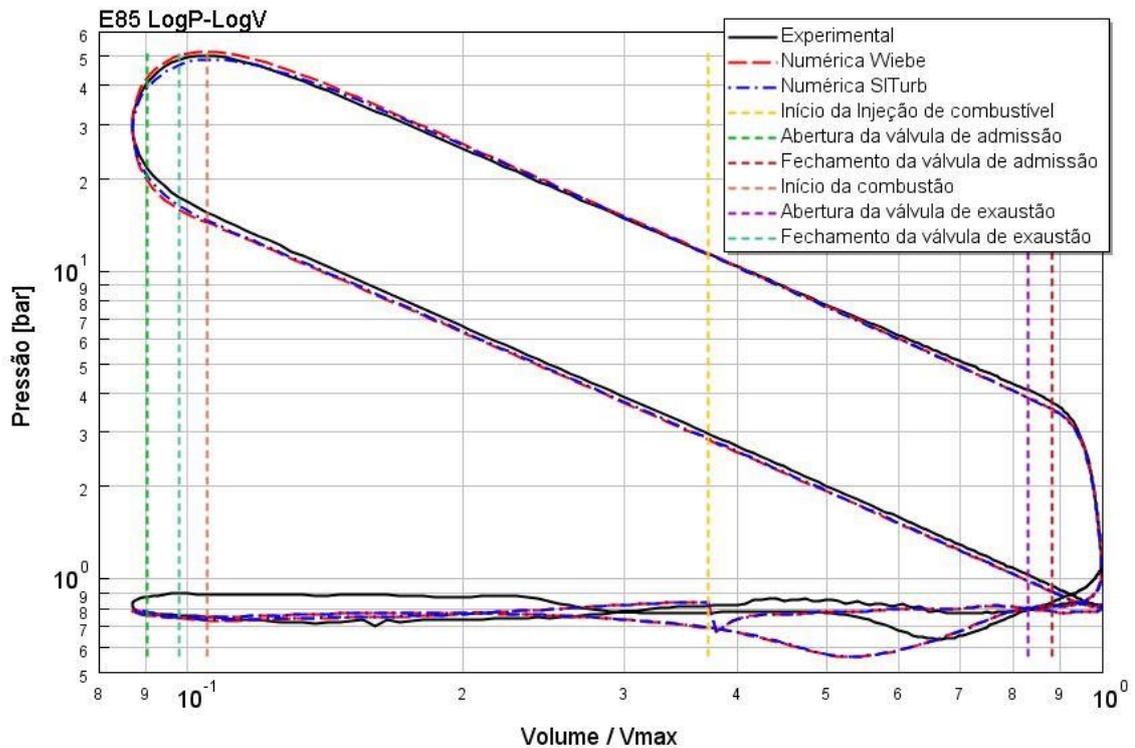
Para a pressão no cilindro os dois modelos não apresentaram divergências graficamente visíveis, sendo possível identificá-las apenas em escala logarítmica. Sendo assim, através do gráfico LogP-LogV, apresentado pela Figura 28, é possível identificar uma divergência numérica entre os modelos na fase da combustão e entre os resultados numéricos e experimentais ressalta-se divergências presentes no fim do *blowdown*, no tempo da exaustão como um todo e no evento de injeção de combustível.

Figura 29 – Correlação das curvas de pressão numéricas dos modelos de combustão prescritivo (Wiebe), preditivo (SITurb) e experimental do caso 8



Fonte: Elaborada pelo Autor

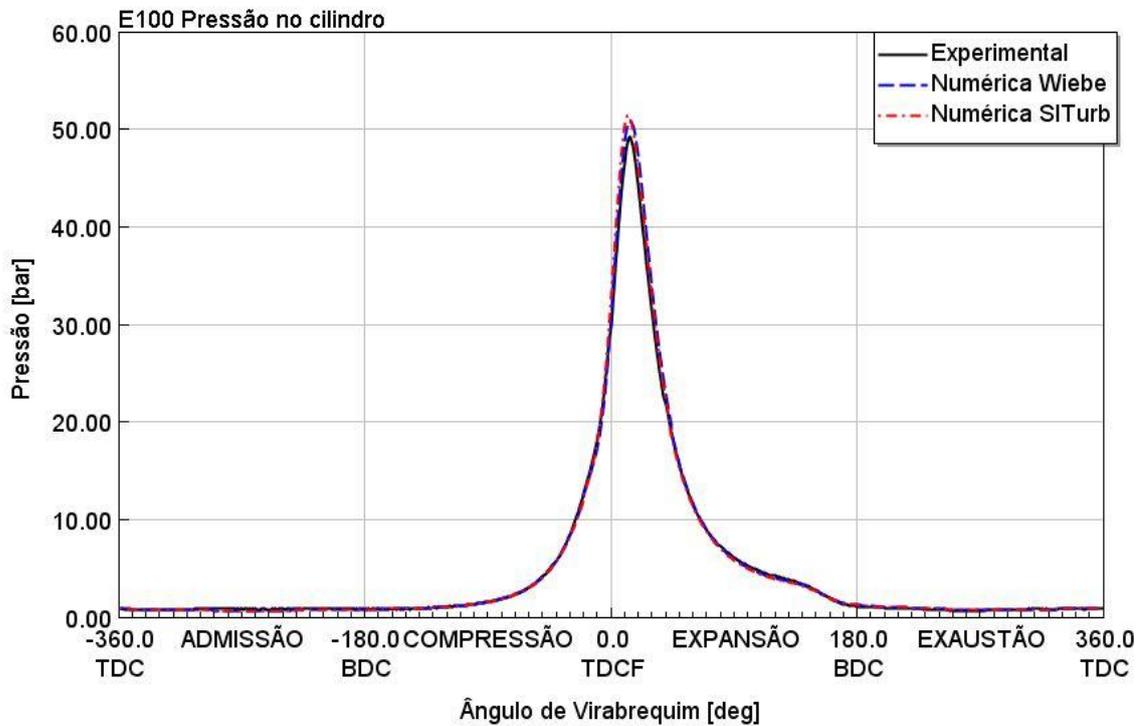
Figura 30 – Correlação dos gráficos LogP-LogV numéricos dos modelos de combustão prescritivo (Wiebe), preditivo (SITurb) e experimental do caso 8



Fonte: Elaborada pelo Autor

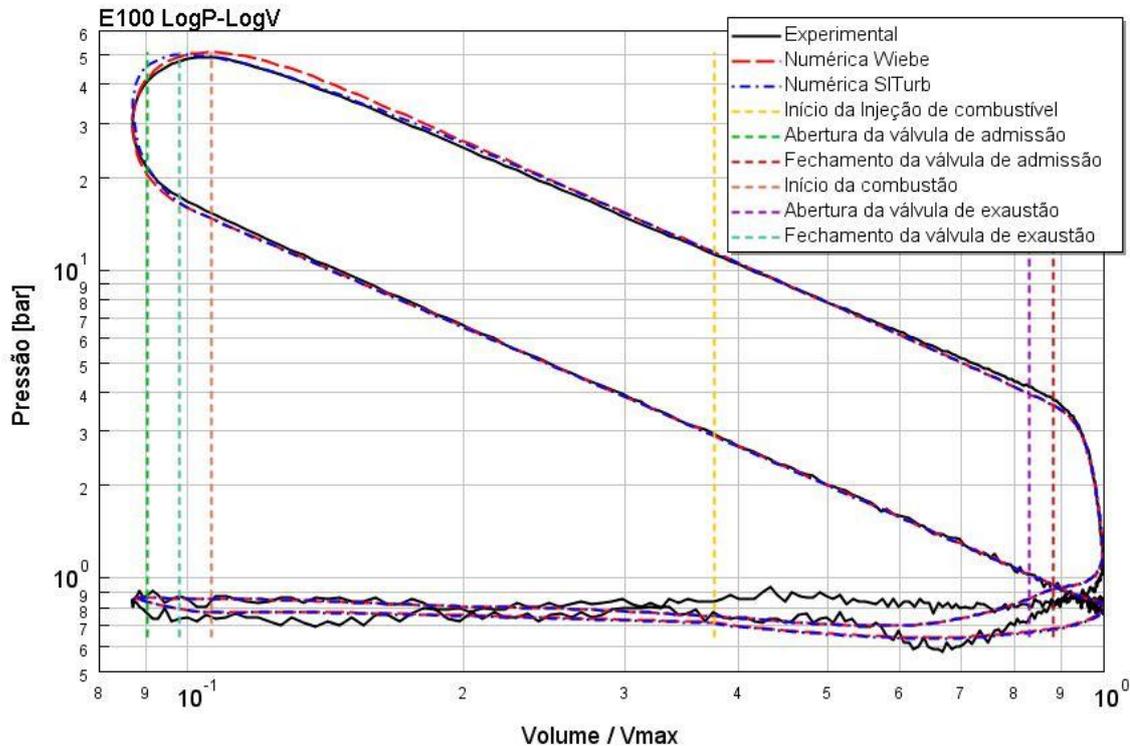
A validação da combustão para o caso 8, aquisitado em *MBT*, rotação de 2000rpm, 8bar de BMEP e operando com E85, foi realizada da mesma forma em relação ao caso 7. Para a pressão no cilindro, apresentada pela Figura 29, a única divergência graficamente visível está situada no pico de pressão. Esses resultados, quando explorados em escala logarítmica, apresentam divergências numéricas e experimentais que seguem a mesma tendência do caso 7, podendo ser identificadas na fase da combustão, no fim do *blowdown*, no tempo da exaustão como um todo e no evento de injeção de combustível, como pode ser verificado na Figura 30.

Figura 31 – Correlação das curvas de pressão numéricas dos modelos de combustão prescritivo (Wiebe), preditivo (SITurb) e experimental do caso 9



Fonte: Elaborada pelo Autor

Figura 32 – Correlação dos gráficos LogP-LogV numéricos dos modelos de combustão prescritivo (Wiebe), preditivo (SITurb) e experimental do caso 9



Fonte: Elaborada pelo Autor

A validação da combustão para o caso 9, aquisitado em *MBT*, rotação de 2000 rpm, 8bar de BMEP e operando com E100, também foi realizada da mesma forma que os casos 7 e 8. A partir da análise da pressão no cilindro, apresentada pela Figura 31, conclui-se que o pico de pressão correspondente à combustão representa a única divergência graficamente visível.

A exploração desses resultados em escala logarítmica, como apresentado pela Figura 32, apresentam, de uma forma geral, boa correlação numérica com os dados experimentais. Entretanto, é possível identificar pequenas divergências nas fases da admissão, exaustão e no período da combustão. Em suma, pode se concluir que para todas as análises de validação da combustão em escala logarítmica a dificuldade de reproduzir a fase de bombeamento está relacionada ao fato de o modelo abordar os fenômenos relacionados ao escoamento no ciclo de operação de motores de combustão interna de forma unidimensional.

4.2. Análise da Detonação

Para a análise da detonação são apresentadas as conclusões correspondentes à avaliação da sensibilidade do modelo de detonação e resultados da exploração da detonação por meio do uso do modelo de combustão preditivo.

4.2.1. Avaliação do modelo de detonação

Para a avaliação do modelo de detonação Douaud & Eyzat, disponível no *software* GT-SUITE[®], foi utilizado um recurso do programa de pós-tratamento dos dados simulados, o GT-POST[®], no qual é apresentado os resultados referentes à Integral do Tempo de Indução da Detonação (KITI) para os casos simulados. Esse recurso foi utilizado para todos os casos apresentados pelas Tabela 3 e Tabela 4. Por meio da análise dos seus resultados, conclui-se que o modelo correspondeu satisfatoriamente às expectativas, detectando a detonação apenas nos casos em que ela realmente ocorreu como pode ser verificado através da Tabela 11.

Tabela 11 – Detecção numérica da detonação induzida experimentalmente.

	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5	Caso 6
	<i>MBT</i>			Detonação		
Avanço de ignição – APMS	18,53°	19,53°	19,5°	20,52°	22,53°	24,53°
KITI	0,90	0,95	0,86	1,04	1,15	1,18

Fonte: Elaborada pelo Autor

4.2.2. Predição da condição de detonação

Para a análise da detonação utilizando o modelo preditivo de combustão, foram escolhidos casos operando em *MBT*, conforme apresentado pela Tabela 5, nos quais não foram exploradas condições de detonação. Portanto, o modelo preditivo de combustão permitiu a exploração do fenômeno da detonação por meio do aumento do avanço de ignição até que o modelo de detonação Douaud & Eyzat disponível no *software* detectasse o fenômeno.

Essa metodologia se mostrou eficaz, uma vez que o modelo de detonação foi testado para as condições disponíveis nas Tabela 3 e Tabela 4, apresentando resultados satisfatórios. Os resultados referentes a essa análise são apresentados

na Tabela 5. Para esses casos 7, 8 e 9 foram necessários um aumento no avanço de ignição para 18°, 23,5° e 23° APMS, respectivamente, para que o modelo detectasse a detonação, como apresentado pela Tabela 12.

Tabela 12 – Extrapolação numérica da condição de detonação através do modelo preditivo.

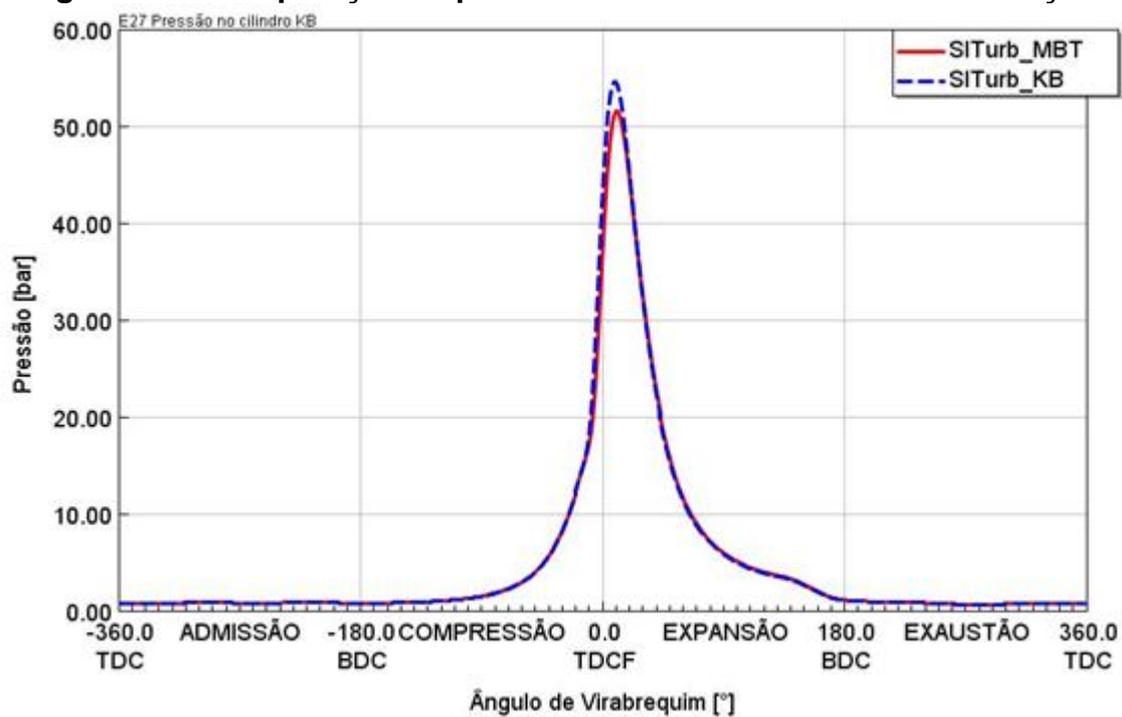
	Caso 7		Caso 8		Caso 9	
	<i>MBT</i>	Detonação	<i>MBT</i>	Detonação	<i>MBT</i>	Detonação
Avanço de ignição - APMS	16,53°	18°	21,53°	23,5°	21,02°	23°
KITI	0,99	1,14	0,95	1,05	0,95	1,05

Fonte: Elaborada pelo Autor

Finalmente, pode-se concluir que o modelo preditivo de combustão satisfaz as expectativas na exploração de uma condição de detonação em casos calibrados em *MBT*.

A princípio se esperava que a curva com detonação apresentasse ruídos próximos ao pico de pressão referente ao fenômeno. Contudo, as condições disponíveis para calibração do modelo constituem uma média de 200 ciclos experimentais, podendo essa ser uma das causas da inabilidade dos modelos a apresentarem oscilações na curva de pressão referentes ao fenômeno de detonação, como pode ser exemplificado pela Figura 33, em que são apresentadas duas curvas numéricas de pressão em função do ângulo de virabrequim, sendo a vermelha em condição de *MBT* e a azul em condição de início de detonação induzida através do modelo preditivo de combustão.

Figura 33 – Comparação da pressão no cilindro sem e com detonação



Fonte: Elaborada pelo Autor

5. CONCLUSÃO

Pode-se concluir que o objetivo proposto neste trabalho, que consistiu na realização do estudo do *software* GT-SUITE[®] para a elaboração de um modelo numérico unidimensional que represente o *SCRE* da empresa AVL[®] do CTM-UFGM, foi atingido. Através desse modelo numérico correspondente ao domínio do *SCRE* e de condições experimentais disponibilizadas a partir de uma bancada dinamométrica com o motor operando com vários teores de etanol na gasolina, em diferentes cargas e rotações, foi realizada uma análise numérica da detonação.

Os três primeiros casos experimentais analisados apresentavam condições de operação em *MBT* e foram utilizados para a validação da combustão. Posteriormente, mais três casos nas mesmas condições de carga, rotação e combustível, em condição de detonação induzida experimentalmente foram utilizados para a validação do modelo de detonação. Essa validação tinha a finalidade de avaliar a sensibilidade do modelo de detonação disponível no *software*, denominado Douaud & Eyzat acoplado ao modelo prescritivo de combustão.

Com o intuito de explorar condições de início de detonação, um modelo preditivo de combustão foi calibrado e validado, e por meio da alteração numérica do avanço de ignição, foi possível a indução do fenômeno da detonação em casos experimentais disponíveis apenas em *MBT*.

Pode-se concluir que o modelo preditivo de combustão se mostrou uma ferramenta eficaz na extrapolação de condições adquiridas experimentalmente, sendo muito útil na exploração numérica da detonação, cuja análise experimental muitas vezes é limitada pela capacidade estrutural do motor.

5.1.Sugestão de trabalhos futuros

A partir do desenvolvimento deste trabalho e da análise de seus resultados foram enumeradas abaixo algumas sugestões para trabalhos futuros. Esses trabalhos serão relevantes para a implementação de modelos de combustão complexos com resultados cada vez mais precisos, não aquisitados experimentalmente, e para utilização de seus resultados em simulações *CFD-3D*, contribuindo assim para a melhor compreensão dos fenômenos envolvidos na operação de um motor de combustão interna. São sugestões:

- Aquisição de dados experimentais de pressão em função do ângulo de virabrequim em pontos dos sistemas de admissão e exaustão mais distantes do cilindro e mais próximos ao meio externo. Essa análise permitirá a exploração de um maior domínio de estudo e uma melhor correlação da análise *TPA* em relação aos dados experimentais;
- Utilização da fração de massa queimada calculada a partir da análise *TPA* mencionada no primeiro tópico para a implementação de um modelo de combustão semi-preditivo com o auxílio da metodologia de redes neurais para cálculo dos parâmetros utilizados na função de Wiebe. Sendo eles: o ângulo de 50% de *MBF*, a duração em graus entre 10 e 90% de *MBF* e o expoente m , conforme é apresentado na Equação 10 deste trabalho;
- Implementação de um modelo preditivo de combustão ancorado no ângulo de 50% de massa queimada adquirida experimentalmente e comparação dos resultados com os calibrados nesse trabalho em relação ao avanço de ignição;
- Exploração mais aprofundada dos modelos de temperatura de parede disponíveis, tanto para os dutos quanto para o cilindro;

REFERÊNCIAS

BAETA, J. G. C. **Metodologia experimental para a maximização do desempenho de um motor multicomcombustível turboalimentado sem prejuízo à eficiência energética global**. 2006. (D. Sc.). Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brasil.

BARROS, J. E. M. Estudo de motores de combustão interna aplicando análise orientada a objetos. **Belo Horizonte: Tese de Doutorado, Engenharia Mecânica, UFMG**, 2003.

BIODIESELBR. ProÁlcool - Externalidades. 2006. Disponível em: < <https://www.biodieselbr.com/proalcool/pro-alcool/programa-externalidades.htm#> >. Acesso em: 22/05.

BLIZARD, N. C.; KECK, J. C. **Experimental and Theoretical Investigation of Turbulent Burning Model for Internal Combustion Engines**: SAE International 1974.

BRASIL, P. Governo estabelece adição de 27% de etanol na gasolina. 2015. Disponível em: < <http://www.brasil.gov.br/economia-e-emprego/2015/03/adicao-de-27-de-etanol-na-gasolina-e-estabelecida-pelo-governo> >. Acesso em: 22/05.

CHAVES, R. T. Estudo do uso de misturas de etanol hidratado e gasolinas automotivas em um motor ASTM-CFR. **Monografia (Graduação)–Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro**, 2013.

CHEN, L. et al. A predictive model for knock onset in spark-ignition engines with cooled EGR. **Energy Conversion and Management**, v. 87, p. 946-955, 2014. ISSN 0196-8904.

DE MOURA, B. V. **O PAPEL DO AÇÚCAR E DA GASOLINA NA DETERMINAÇÃO DOS PREÇOS DE ETANOL NO BRASIL**. 2014. Universidade Federal do Rio de Janeiro

DE SOUZA, G. L.; BRACARENSE, A. Q.; MASSARANI, M. Residência tecnológica para engenheiros. **Blucher Engineering Proceedings**, v. 3, n. 1, p. 620-625, 2016. ISSN 2357-7592.

DE SOUZA, G. R. **Estudo experimental e numérico do sistema de admissão de um motor de combustão interna**. 2010. Universidade de São Paulo

DOUAUD, A. M.; EYZAT, P. **Four-Octane-Number Method for Predicting the Anti-Knock Behavior of Fuels and Engines**: SAE International 1978.

FEITOSA, M. V. et al. PARTIDA A FRIO DE MOTORES MOVIDOS A ETANOL E MISTURAS ETANOL-GASOLINA-INFLUÊNCIA DA VAPORIZAÇÃO DE COMBUSTÍVEL NO COLETOR DE ADMISSÃO. 2000.

FERREIRA FILHO, V. S. et al. Inovar-Auto & Alianças Estratégicas: Um novo cenário de cooperação para Montadoras e Fornecedores de Auto-peças. **X SEGet-Simpósio de Excelência em Gestão e Tecnologia**, v. 23, 2013.

FONSECA, L. G. **Caracterização do escoamento de ar em um motor de combustão interna utilizando mecânica dos fluidos computacional**. 2014. (Dissertação de M.Sc.). Departamento Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Minas, Belo Horizonte, MG, Brasil.

GERVÁSIO, D. T. **Metodologia de correlação e análise de modelos fluidodinâmicos 1D para motores de combustão interna**. 2017. 136 (Dissertação de Mestrado). Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, Pernambuco, Brasil.

HEYWOOD, J. **Internal combustion engine fundamentals**. McGraw-Hill Education, 1988. ISBN 007028637X.

HVĚZDA, J. A Multi-Zone Model of the Combustion Process in an Si Engine as an External Cylinder of the Gt-Power Simulation Tool. **Journal of Middle European Construction and Design of Cars**, v. 12, n. 3, p. 8-14, 2014. ISSN 1804-9338.

JO, Y. S. et al. Performance Maps of Turbocharged SI Engines with Gasoline-Ethanol Blends: Torque, Efficiency, Compression Ratio, Knock Limits, and Octane. 2014. ISSN 0148-7191.

LANZANOVA, T. D. M. Avaliação numérica e experimental do desempenho de um motor Otto operando com etanol hidratado. 2013.

LI, T.; WANG, B.; ZHENG, B. A comparison between Miller and five-stroke cycles for enabling deeply downsized, highly boosted, spark-ignition engines with ultra expansion. **Energy Conversion and Management**, v. 123, p. 140-152, 2016. ISSN 0196-8904.

LI, T.; ZHENG, B.; YIN, T. Fuel conversion efficiency improvements in a highly boosted spark-ignition engine with ultra-expansion cycle. **Energy Conversion and Management**, v. 103, p. 448-458, 2015. ISSN 0196-8904.

LIRA, F. P. D. **Análise experimental do consumo de um veículo flex operando com diferentes misturas de gasolina/etanol em tráfego urbano**. 2015. Universidade Federal do Rio Grande do Norte

LIVENGOOD, J.; WU, P. Correlation of autoignition phenomena in internal combustion engines and rapid compression machines. Symposium (International) on combustion, 1955, Elsevier. p.347-356.

MALALASEKERA, W.; VERSTEEG, H. An introduction to computational fluid dynamics. **The finite volume method**, Harlow: Prentice Hall, p. 1995, 1995.

MARTINS, M. E.; LANZANOVA, T. D. Full-load Miller cycle with ethanol and EGR: potential benefits and challenges. **Applied Thermal Engineering**, v. 90, p. 274-285, 2015. ISSN 1359-4311.

MELO, T. **Análise experimental e simulação computacional de um motor flex operando com diferentes misturas de etanol hidratado na gasolina**. 2012. Thesis, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

MÜGGE, L. V. Análise da sensibilidade de um motor Otto carburado a diversos teores de álcool anidro adicionado à gasolina A. 2016.

NETO, J. C. B. Simulação de emissões de misturas gasolina/etanol em motores de combustão interna. 2012.

PULKRABEK, W. W. **Engineering fundamentals of the internal combustion engine**. Prentice Hall, 2004. ISBN 0131405705.

ROSO, V. R. **Análise da Combustão em Motores Diesel Utilizando Simulação Computacional**. 2012. 94 (Graduação). Centro de Tecnologia, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria.

SEIXAS, P. H. T. **Efeitos da razão volumétrica de compressão e do tipo de combustível na combustão, eficiência e emissões de um motor com injeção direta**. 2017. (Dissertação de M.Sc.). Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brasil.

TECHNOLOGIES, G. **GT-SUITE Engine Performance**. Oakmont Lane, Westmont 2015a.

_____. **GT-Suite Flow Theory Manual**. Oakmont Lane, Westmont 2015b.

WANG, Y. et al. Performance analysis of a Miller cycle engine by an indirect analysis method with sparking and knock in consideration. **Energy Conversion and Management**, v. 119, p. 316-326, 2016. ISSN 0196-8904.

ZHAO, H. **Advanced Direct Injection Combustion Engine Technologies and Development: Diesel Engines**. Elsevier, 2009. ISBN 1845697456.