

Clarissa de Moraes Martins

**Avaliação de mecanismo cinético químico  
reduzido na predição de emissão de poluentes  
específicos por motores de combustão interna  
para misturas de gasolina e etanol**

Belo Horizonte,  
31 de julho de 2018

Clarissa de Moraes Martins

**Avaliação de mecanismo cinético químico reduzido na  
predição de emissão de poluentes específicos por motores  
de combustão interna para misturas de gasolina e etanol**

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

Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG

Departamento de Engenharia Mecânica

Programa de Pós-Graduação

Orientador: José Guilherme Coelho Baeta

Coorientador: Gustavo de Queiroz Hindi

Belo Horizonte,  
31 de julho de 2018

M386a	<p data-bbox="549 1458 852 1487">Martins, Clarissa de Moraes.</p> <p data-bbox="549 1487 1342 1592">Avaliação de mecanismo cinético químico reduzido na predição de emissão de poluentes específicos por motores de combustão interna para misturas de gasolina e etanol [manuscrito] / Clarissa de Moraes Martins. - 2018.</p> <p data-bbox="549 1592 711 1621">137 f., enc.: il.</p> <p data-bbox="584 1648 1034 1677">Orientador: José Guilherme Coelho Baêta.</p> <p data-bbox="584 1677 1023 1706">Coorientador: Gustavo de Queiroz Hindi.</p> <p data-bbox="528 1733 1246 1787">Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Minas Gerais, Escola de Engenharia.</p> <p data-bbox="568 1814 823 1843">Bibliografia: f. 121-124.</p> <p data-bbox="549 1870 1342 2002">1. Engenharia mecânica - Teses. 2. Método dos volumes finitos - Teses. 3. Motores de combustão interna - Teses. 4. Poluentes - Teses. I. Baêta, José Guilherme Coelho. II. Hindi, Gustavo de Queiroz. III. Universidade Federal de Minas Gerais. Escola de Engenharia. IV. Título.</p> <p data-bbox="1034 2002 1198 2029">CDU: 621(043)</p>
-------	---



**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](mailto:cpgmec@demec.ufmg.br)

**"AVALIAÇÃO DE MECANISMO CINÉTICO QUÍMICO REDUZIDO  
NA PREDIÇÃO DE EMISSÃO DE POLUENTES ESPECÍFICOS POR  
MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA PARA MISTURAS DE  
GASOLINA E ETANOL"**

**CLARISSA DE MORAES MARTINS**

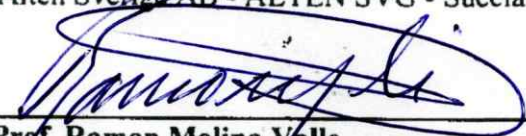
Dissertação submetida à Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Minas Gerais, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de "Mestre em Engenharia Mecânica", na área de concentração de "ENERGIA E SUSTENTABILIDADE".


Dissertação aprovada no dia 31 de julho de 2018.

Por:

  
\_\_\_\_\_  
**Prof. Jose Guilherme Coelho Baeta**  
Orientador - Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG

  
\_\_\_\_\_  
**Dr. Gustavo de Queiroz Hindi**  
Coorientador - Alten Sverige AB - ALTEN SVG - Suécia

  
\_\_\_\_\_  
**Prof. Ramon Molina Valle**  
Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG

  
\_\_\_\_\_  
**Prof. Rudolf Huebner**  
Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG

# AGRADECIMENTOS

Esses dois anos e meio como aluna de mestrado no Centro de Tecnologia da Mobilidade da UFMG e do Programa de Residência Tecnológica para Engenheiros da FCA foram de muito aprendizado e trabalho. Sou muito grata pela oportunidade que me foi dada ao meu orientador, professor José Guilherme Coelho Baeta, ao coorientador Gustavo de Queiroz Hindi e a Fiat Chrysler Automobiles. Agradeço também aos professores Rudolf Hübner e Ramón Molina Valle por me convidarem a fazer o mestrado, participar deste projeto e pela disponibilidade em me tirar dúvidas.

Com muito carinho, agradeço a equipe formada para realização deste trabalho: Filipe, Gabi, Raphael e Thiago, pelo incentivo, trabalho em equipe, dedicação e amizade. Também agradeço aos demais amigos que fiz no CFD do CTM-UFMG: Bulinha, Bruninho, Brunão, Fábio, Déborah, Amanda, Léo, Kilder e Mike.

Agradeço a Roberto Schor, da FCA, cujo apoio na fase final do trabalho foi fundamental para realização das simulações. Agradeço ao Convergent Science pelas licenças concedidas ao laboratório do programa CONVERGE e disponibilidade para responder questionamentos sobre o seu funcionamento. Agradeço à equipe experimental do CTM-UFMG e a todos os colegas deste laboratório que colaboraram de alguma forma para a realização deste trabalho. Agradeço a Marina, secretária da pós, pelos cafés e momentos de descontração.

Agradeço também aos meus amigos: Koppa, Angélica e Nicole pelos momentos de descontração e incentivo. Ao Lucas, Tiago, Rômulo e Diniz pela amizade e por sempre me alegrarem. Minha gratidão pelos ensinamentos de Yoga e meditação as professoras Letícia e Vydia, que me desanuviavam a mente depois de um dia de trabalho. Agradeço acima de tudo e de todo o coração a Deus e também a minha família,

A todos,

*Namastê.*

*Lokah samastah sukhino bhavantu*  
*"Que todos os seres sejam felizes"*  
*(Mantra em sânscrito)*

# RESUMO

No Brasil, veículos automotivos são umas das principais fontes de poluição do ar em áreas urbanas. Os gases de exaustão do motor de combustão interna podem conter óxidos de nitrogênio, monóxido de carbono, hidrocarbonetos não queimados e parcialmente queimados e fuligens, que são responsáveis por problemas ambientais e de saúde humana. Normas internacionais para emissão de poluentes e programas nacionais de incentivo a indústria automotiva, como o recentemente aprovado Rota 2030, tornam cada vez mais restritivos os índices de emissões para o setor automotivo. Com isso, o desenvolvimento de motores mais eficientes e o uso de combustíveis alternativos tornaram-se ainda mais relevantes. No país, o uso do etanol como aditivo à gasolina, vem se mostrando uma alternativa eficiente, de alto impacto na redução da dependência dos combustíveis de origem fóssil e das emissões veiculares de gases efeito estufa. Assim, faz-se necessário o estudo do comportamento da combustão de misturas de etanol e gasolina em motores a combustão interna e para isso o método dos volumes finitos em conjunto com mecanismos cinéticos químicos reduzidos podem ser aplicados em análises preditivas desse processo. Assim, este trabalho tem como objetivo, avaliar o comportamento de um mecanismo cinético químico reduzido com 75 espécies e 343 reações químicas, na predição de poluentes específicos ( $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO_x$  e  $HC$ ). A metodologia consiste na realização de simulações numéricas de um motor de combustão interna operando com diferentes misturas de gasolina e etanol como combustível (E22, E50, E85 e E100) com mesma rotação e carga. As emissões calculadas nos modelos computacionais foram avaliadas de forma qualitativa observando-se a tendência nos dados de emissões para as diferentes misturas e com base nos resultados experimentais obtidos do banco de dados do Centro de Tecnologia da Mobilidade (CTM-UFGM). Os resultados mostraram uma maior reatividade do mecanismo cinético químico para o combustível E22 indicando que este pode ser aprimorado. A mistura ar-combustível influenciou nos resultados de emissões para  $CO_2$ ,  $CO$  e  $HC$ , devido a formação de regiões com excesso de combustível no cilindro. Entretanto, pôde-se observar, como indicado por estudos na literatura, a redução de  $NO_x$  com o aumento do conteúdo de etanol nos combustíveis. Concluí-se que para a predição da combustão e da emissões de poluentes, o mecanismo cinético químico reduzido utilizado neste trabalho pode ser aprimorado e a modelagem computacional da formação de mistura para combustíveis multicomponentes também pode ser melhor aprimorada.

**Palavras-chaves:** Volumes Finitos. Emissões de poluentes. Motores de combustão interna. Mecanismos cinéticos químicos reduzidos.

# ABSTRACT

In Brazil, the automotive sector consists in one of the main sources of air pollution in urban areas. Exhaust gases from internal combustion engines may contain pollutants as nitrogen oxides, carbon monoxide, unburned and partially burned hydrocarbons and soot, which are responsible for environmental and human health problems. International regulations for emission of pollutants as well as current national programs to stimulate the automotive industry, such as the recently approved Rota 2030, make emissions levels for this sector increasingly strict. As a result, the development of more efficient engines and the use of alternative fuels have become even more relevant. The use of ethanol as an additive to gasoline has proved to be an efficient alternative in Brazil by reducing the dependence on fossil fuels and vehicular emissions of greenhouse gases. Thus, it is necessary an in-depth study of the combustion process of ethanol and gasoline mixtures in internal combustion engines. With this in mind, the finite volume method together with reduced chemical kinetic mechanisms have been largely applied. However, most studies found on literature report numerical analysis of compression ignition engines. Thus, the objective of this work is to evaluate the prediction of specific pollutants (CO, CO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub> and HC) in an internal combustion engine by applying a reduced chemical kinetic mechanism with 75 species and 343 chemical reactions to model the combustion process. The methodology consists in carrying out numerical simulations of an internal combustion engine operating with different gasoline and ethanol mixtures as fuel (E22, E50, E85 and E100) at the same engine speed and load. The emissions calculated in the computational models were evaluated qualitatively observing the trend in emissions data for different mixtures and based on the experimental results obtained from the database of Centro de Tecnologia da Mobilidade (CTM-UFMG). The results showed a high reactivity level of the chemical kinetic mechanism for the fuel E22 indicating that the chemical kinetic mechanism can be improved. The air-fuel mixture impacted the emissions of CO<sub>2</sub>, CO and HC due to the formation of regions with excess of fuel in the cylinder. However, it could be observed, as indicated by studies in literature, the reduction of NO<sub>x</sub> for the mixtures with higher content of ethanol in the fuel. It is concluded then, that for the prediction of combustion and pollutant emissions, the reduced chemical kinetic mechanism used in this work needs adjustments and the numerical modeling of the formation of the mixture for multicomponent fuels can be improved.

**Key-words:** Finit Volume Method. Internal combustion engines. Pollutant emissions. Reduced chemical kinetic mechanism.



# LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Crescimento das emissões de gases efeito estufa de 1900 até 2014 . . . . .	18
Figura 2 – Emissões globais de gases efeito estufa para o ano de 2015 . . . . .	18
Figura 3 – Emissões de particulados em cidades brasileiras . . . . .	19
Figura 4 – Os quatro tempos dos motores de ignição por centelha . . . . .	23
Figura 5 – Indicação dos volumes máximos e mínimos no cilindro: cilindro com o pistão no PMS à esquerda e no PMI à direita . . . . .	25
Figura 6 – Eficiência térmica para o ciclo ideal Otto . . . . .	26
Figura 7 – Tecnologia de injeção de combustível <i>Wall-Guided</i> . . . . .	29
Figura 8 – Tecnologia de injeção de combustível <i>Spray-Guided</i> . . . . .	29
Figura 9 – Tecnologia de injeção de combustível <i>Air-Guided</i> . . . . .	30
Figura 10 –Escoamentos de grande escala . . . . .	31
Figura 11 –Geometrias de injetores de combustível de para motores DI . . . . .	31
Figura 12 –Relação entre razão de equivalência $\phi$ e emissões . . . . .	33
Figura 13 –Tipos de escoamentos em grande escala . . . . .	36
Figura 14 –A emissão de CO para diferentes razões ar-combustível . . . . .	45
Figura 15 –Mecanismo de emissão de hidrocarbonetos não queimados . . . . .	46
Figura 16 –Modelo de atomização de gotas de Kelvin-Helmholtz . . . . .	56
Figura 17 –Modelo de atomização de gotas de Rayleigh-Taylor . . . . .	58
Figura 18 –Analogia do modelo TAB . . . . .	58
Figura 19 –Modelos de interação gotas-parede . . . . .	61
Figura 20 –Motor AVL . . . . .	79
Figura 21 –Detalhes internos do Motor AVL . . . . .	80
Figura 22 –Domínio computacional . . . . .	81
Figura 23 –Referência para eventos no motor . . . . .	82
Figura 24 –Malha superficial - Pistão em PMI . . . . .	83
Figura 25 –Malha no domínio . . . . .	84
Figura 26 –Curva de levantamento das válvulas . . . . .	86
Figura 27 –Pressão total na admissão . . . . .	86
Figura 28 –Pressão estática na exaustão . . . . .	87
Figura 29 –Perfil de injeção de combustível . . . . .	90
Figura 30 –Temperatura da carga no cilindro no ângulo de virabrequim $-10^\circ$ . . . . .	98
Figura 31 –Curvas de temperatura da carga no cilindro . . . . .	99
Figura 32 –Curvas de pressões no cilindro . . . . .	100
Figura 33 –Resultados para combustão da mistura E22 . . . . .	101

Figura 34 – Formação de OH na combustão das misturas E22 e E85 . . . . .	102
Figura 35 – Comparação entre os resultados numéricos e experimentais para as curvas de temperatura da carga dentro do cilindro . . . . .	104
Figura 36 – Índice de emissão $CO_2$ . . . . .	105
Figura 37 – Índice de emissão $CO$ . . . . .	106
Figura 38 – Emissão de HC . . . . .	106
Figura 39 – Razão de equivalência combustível-ar média . . . . .	107
Figura 40 – Distribuição local da razão de equivalência . . . . .	109
Figura 41 – Índice de emissão de $NO_x$ para os modelos numéricos . . . . .	110
Figura 42 – Formação de $NO_x$ em relação a temperatura no cilindro . . . . .	111
Figura 43 – NO - Início da Formação de NO . . . . .	112
Figura 44 – NO - Ângulo próximo ao pico de pressão . . . . .	113
Figura 45 – NO - Ângulo próximo ao pico de temperatura . . . . .	114
Figura 46 – CO - Ângulo próximo ao pico de pressão . . . . .	114
Figura 47 – Concentração máxima de CO . . . . .	115
Figura 48 – Concentração mássica de CO na exaustão . . . . .	115
Figura 49 – Casos D1-D4 . . . . .	131
Figura 50 – Comparação da pressão no cilindro . . . . .	131
Figura 51 – Taxa de liberação de calor . . . . .	132
Figura 52 – Casos D5-D8 . . . . .	133
Figura 53 – Pressão no cilindro D5-D8 . . . . .	133
Figura 54 – Taxa de liberação de calor D5-D8 . . . . .	134
Figura 55 – Casos D9-D12 . . . . .	134
Figura 56 – Pressão no cilindro D9-D12 . . . . .	135
Figura 57 – Taxa de liberação de calor D9-D12 . . . . .	135

# LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Combustíveis mais utilizados no Brasil . . . . .	37
Tabela 2 – Comparação entre as propriedades físico-químicas médias da gasolina e etanol . . . . .	40
Tabela 3 – Propriedades de misturas de gasolina e etanol . . . . .	41
Tabela 4 – Quantidade de gás entre em folgas do cilindro . . . . .	47
Tabela 5 – Valores Típicos de R1, R1/R2 e R1/(R2+R3) . . . . .	70
Tabela 6 – Principais trabalhos consultados . . . . .	76
Tabela 7 – Mecanismos cinéticos químicos . . . . .	77
Tabela 8 – Dados do motor mono-cilindro AVL . . . . .	80
Tabela 9 – Tolerância para convergência das equações . . . . .	82
Tabela 10 – Refinamento Fixo . . . . .	84
Tabela 11 – Tamanhos das células testados no teste de malha . . . . .	85
Tabela 12 – Temperaturas nas entradas e saídas dos domínios . . . . .	87
Tabela 13 – Temperaturas dos sub-domínios computacionais . . . . .	88
Tabela 14 – Condições iniciais de pressão e temperatura . . . . .	88
Tabela 15 – Condições iniciais para gases nas fronteiras . . . . .	89
Tabela 16 – Composição das misturas de Gasolina e Etanol . . . . .	89
Tabela 17 – Posicionamento e direção dos furos do injetor BOSCH HDEV 5.1 . . . . .	90
Tabela 18 – Parâmetros medidos utilizados como dados de entrada nos modelos numéricos . . . . .	91
Tabela 19 – Coeficiente de descarga . . . . .	91
Tabela 20 – Coeficientes de difusividade mássica . . . . .	92
Tabela 21 – Dados experimentais de emissão de poluentes . . . . .	94
Tabela 22 – Vazão mássica de combustível . . . . .	95
Tabela 23 – Número de células do domínio . . . . .	97
Tabela 24 – Quantidade de núcleos computacionais utilizados nas simulações . . . . .	98
Tabela 25 – Comparação das pressões médias efetivas . . . . .	100
Tabela 26 – Comparação dos ângulos de queima . . . . .	102
Tabela 27 – Comparação entre temperaturas médias da carga no cilindro numéricas e obtidas dos dados experimentais . . . . .	103
Tabela 28 – Massa aprisionada no cilindro . . . . .	107
Tabela 29 – Composição mássica E27 . . . . .	129
Tabela 30 – Coeficientes de difusividade . . . . .	129
Tabela 31 – Simulações computacionais do motor monocilíndrico de pesquisa . . . . .	130

# LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AMR	Refinamento de malha adaptativo do inglês <i>Adaptive Mesh Refinement</i>
CAD	Projetos assistidos por computador do inglês <i>Computer Aided Design</i>
CFD	Dinâmica dos fluidos computacional do inglês <i>Computational Fluid Dynamics</i>
CO	Monóxido de carbono
CO <sub>2</sub>	Dióxido de carbono
CFL	do inglês <i>Courant-Friedrichs-Lewy</i>
CTM	Centro de Tecnologia da Mobilidade
DI	Injeção direta do inglês <i>Direct Injection</i>
E22	Mistura de gasolina e etanol (22% em volume de etanol)
E50	Mistura de gasolina e etanol (50% em volume de etanol)
E100	Mistura de gasolina e etanol (94% em volume de etanol)
EGR	Recuperação dos gases de exaustão do inglês <i>Exhaust Gas Recovery</i>
H	Hidrogênio
HC	Hidrocarbonetos não queimados ou parcialmente queimados
HCN	Cianeto de hidrogênio
KHRT	Modelo de atomização de combustível de Kelvin-Helmholtz Rayleigh-Taylor
MBF	Fração de massa queimada do inglês <i>Mass Fraction Burnt</i>
MCI	Motor de combustão interna
N	Nitrogênio
NTC	Modelo de colisões <i>No Time Counter</i> de gotas
NO <sub>x</sub>	Óxidos de nitrogênio
O	Oxigênio

ON	Octanagem
PISO	do inglês <i>Pressure implicit with splitting of operators</i>
PFI	Injeção de combustível nos pórticos do inglês <i>Port Fuel Injection</i>
PRF	Combustível de referência primária do inglês <i>Primary Reference Fuel</i>
RANS	Equações de Navier-Stokes por média de Reynolds do inglês <i>Reynolds Averaged Navier Stokes</i>
RNG	Modelo de turbulência de grupo de renormalização do inglês <i>Re-Normalization Group</i>
RON	Número de octanos de pesquisa do inglês <i>Research Octane Number</i>
RPM	Rotações por minuto
TRF	Combustível de referência Tolueno do inglês <i>Toluene Reference Fuel</i>

# LISTA DE SÍMBOLOS

$c$	Velocidade do som [ $m/s$ ]
$D$	Difusidade mássica [ $m^2/s$ ]
$La$	número de Laplace
$p$	Pressão [Pa]
$R$	Constante universal dos gases [ $JK^{-1}mol^{-1}$ ]
$S$	Termo fonte [N]
$t$	Tempo [s]
$T$	Temperatura [K]
$T_c$	Temperatura crítica [K]
$u$	Velocidade [ $m/s$ ]
$We$	Número de Weber
$\rho$	Densidade [ $kg/m^3$ ]
$\tau_{ij}$	Tensão viscosa [Pa]
$\delta_{ij}$	Delta de Kronecker
$\nu$	Viscosidade cinemática [ $m^2/s$ ]
$\mu$	Viscosidade dinâmica [ $Nsm^{-2}$ ]

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>17</b>
1.1	Objetivo Geral	22
<b>2</b>	<b>REVISÃO DA LITERATURA</b>	<b>23</b>
2.1	Fundamentos Teóricos	23
2.1.1	Ciclo real para Motores de Combustão Interna	23
2.1.2	Razão Volumétrica de Compressão	25
2.1.3	Pressão Média Efetiva	26
2.1.4	Formação da Mistura Ar-Combustível	27
2.1.4.1	Injeção Direta de Combustível	27
2.1.4.2	Tipos de Injetores DI	31
2.1.4.3	Razão de Equivalência Combustível-Ar	32
2.1.4.4	Turbulência	34
2.1.5	Movimentos da Carga em Grande Escala	35
2.1.6	Combustíveis	37
2.1.6.1	Gasolina	37
2.1.6.2	Etanol	38
2.1.6.3	Misturas de Gasolina e Etanol	40
2.1.7	Emissões de Poluentes em MCI	41
2.1.7.1	Óxidos de Nitrogênio	42
2.1.7.2	Monóxido de Carbono	43
2.1.7.3	Hidrocarbonetos Não-Queimados	45
2.1.8	Dinâmica de Fluidos Computacional Aplicada a Motores de Combustão Interna	48
2.1.8.1	Equações de Conservação	49
2.1.8.2	Modelo de Turbulência <i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i>	51
2.1.8.3	Algoritmo PISO	53
2.1.8.4	Número CFL e Passo de Tempo	54
2.1.8.5	Modelos Computacionais de Injeção de Combustível	54
2.1.8.6	Modelo Computacional de Arrasto de Gotas e Acoplamento das Fases Líquida/Gasosa	57
2.1.8.7	Modelo Computacional de Colisão de Gotas e Coalescência	59
2.1.8.8	Modelos Computacionais para Interação das Gotas de Combustível com as Paredes	60
2.1.8.9	Modelo Computacional de Evaporação do Combustível	64

2.1.8.10	Modelo Computacional de Combustão . . . . .	65
2.1.8.11	Mecanismos Cinéticos Químicos . . . . .	67
2.1.8.12	Modelos de Emissões de Poluentes . . . . .	68
2.2	Estado da Arte . . . . .	72
2.2.1	Considerações Finais . . . . .	75
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA . . . . .</b>	<b>77</b>
3.1	O Projeto . . . . .	77
3.2	Motor Monocilíndrico de Pesquisa . . . . .	78
3.3	Domínio Computacional . . . . .	81
3.4	Modelo Computacional . . . . .	81
3.5	Geração da Malha de Volumes Finitos . . . . .	82
3.5.1	Teste de Malha . . . . .	85
3.6	Condições de Contorno . . . . .	85
3.7	Condições Iniciais . . . . .	88
3.8	Combustíveis Utilizados . . . . .	89
3.9	Injeção e Atomização do Combustível . . . . .	90
3.10	Modelo de Combustão Utilizado . . . . .	92
3.11	Emissões de Poluentes Analisadas . . . . .	93
3.11.1	Cálculo dos Índices de Emissões . . . . .	94
<b>4</b>	<b>Resultados e Discussão . . . . .</b>	<b>97</b>
4.1	Resultados do Teste de Malha . . . . .	97
4.2	Desempenho dos Modelos Computacionais 3D com o Mecanismo de COTA, 2018 . . . . .	99
4.3	Resultados dos Índices de Emissões . . . . .	105
4.4	Resultados da Análise Qualitativa da Mistura E85 . . . . .	111
4.4.1	Considerações Finais sobre os Resultados . . . . .	116
<b>5</b>	<b>Conclusão . . . . .</b>	<b>117</b>
<b>6</b>	<b>Sugestão de trabalhos futuros . . . . .</b>	<b>119</b>
	<b>Referências . . . . .</b>	<b>120</b>
	<b>Anexos . . . . .</b>	<b>124</b>
	<b>ANEXO A Ensaios Experimentais . . . . .</b>	<b>125</b>
	<b>ANEXO B Teste dos Coeficientes de Difusividade Mássica . . . . .</b>	<b>129</b>
B.1	Resultados . . . . .	130



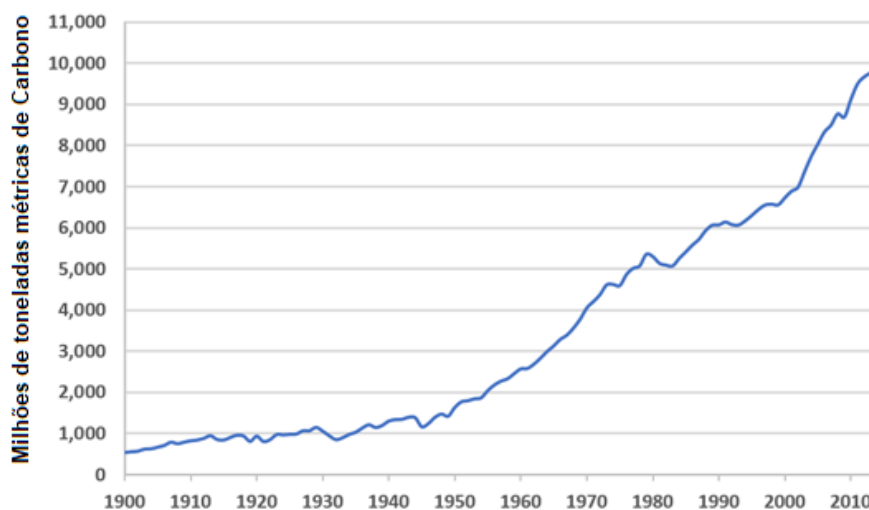
B.1.0.1	Casos D1-D4: E27, 2000 rpm e 4Bmep . . . . .	130
B.1.0.2	Casos D5-D8: E27, 2000 rpm e 8 Bmep . . . . .	132
B.1.0.3	Casos D9-D12: E27, 3500 rpm e 8 Bmep . . . . .	134

# 1 INTRODUÇÃO

As emissões de poluentes pelos veículos automotivos são atribuídas principalmente a queima de combustíveis fósseis em motores de combustão interna. O impacto dessas emissões na saúde humana e no meio ambiente tem sido abordado em muitos estudos na literatura ([MARLAND G.; BODEN et al., 2003](#); [DALLMANN; FAÇANHA, 2017](#); [U.S. ENVIROMENTAL PROTECTION AGENCY, 2017](#); [MINC, 2013](#)) sendo o estado da Califórnia pioneiro na implementação de padrões para a emissões nos anos de 1960. Nessa época, pesquisas comprovaram que em áreas urbanas as emissões de hidrocarbonetos e óxidos de nitrogênios eram causadas principalmente pelos veículos automotivos e eram prejudiciais a saúde. Essa tendência logo se tornou mundial e desde então são estabelecidas regulamentações cada vez mais restritas para o controle das emissões veiculares de poluentes ([HEYWOOD, 1988](#)).

Segundo [Heywood \(1988\)](#), os gases de exaustão de motores de combustão interna (MCI) são compostos de óxidos de nitrogênio ( $NO_x$ ), monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono ( $CO_2$ ), água ( $H_2O$ ) e outros compostos orgânicos tais como: hidrocarbonetos não queimados e parcialmente queimados (HC). Em combustíveis alcoólicos tem-se também a emissão de oxigenados como aldeídos e para gasolinas a emissão de compostos sulfúricos. Os óxidos de nitrogênio e sulfúricos reagem com os gases da atmosfera e formam substâncias que podem causar problemas respiratórios, doenças cardíacas e também afetam o meio ambiente levando a formação de *smog* e chuva ácida. Já a emissão de particulados, está relacionada a ocorrência de doenças pulmonares e cardíacas, principalmente quando possuem tamanhos menores que  $100\mu m$ , quando são facilmente inalados. No meio ambiente, esse poluente também é apontado como causa de acidificação de lagos e redução da visibilidade em áreas urbanas. O monóxido de carbono pode ser letal quando em alta concentração, pois quando inalado reduz a capacidade de oxigenação do corpo devido a sua alta afinidade com moléculas de hemoglobina. O dióxido de carbono, por sua vez, está associado principalmente ao efeito estufa. Desde 1900, as emissões globais de gases efeito estufa cresceram significativamente. A partir dos anos 1970 a queima de combustíveis fósseis e processos industriais contribuíram para esse aumento em cerca de 78% , conforme ilustrado na Figura 1 ([U.S. ENVIROMENTAL PROTECTION AGENCY, 2017](#)).

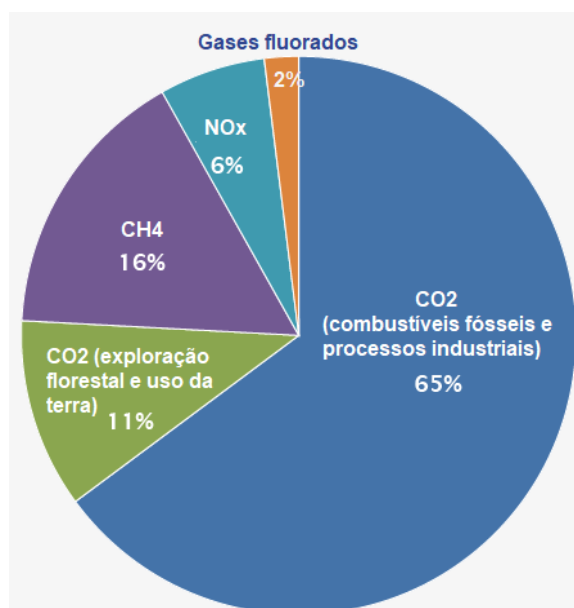
Figura 1 – Crescimento das emissões de gases efeito estufa de 1900 até 2014



Fonte: Adaptado de (U.S. ENVIROMENTAL PROTECTION AGENCY, 2017)

A Figura 2 apresenta dados globais para o ano de 2015 e mostra que o dióxido de carbono é o gás predominante nas emissões provenientes do uso de combustíveis fósseis como fonte de energia. No setor automotivo, de acordo com Johnson (2016) no ano de 2015 ocorreram avanços significativos na legislação em relação a poluição em países como China e Índia. Na Europa, os fabricantes de automóveis terão que monitorar e reportar as emissões por meio de protocolos e foi colocado como meta a redução de 1,5X os níveis de  $NO_x$  até 2020. Nos Estados Unidos foram estabelecidos níveis mais restritos de emissões de  $NO_x$  e gases efeito estufa (4-7% para motores) (JOHNSON, 2016).

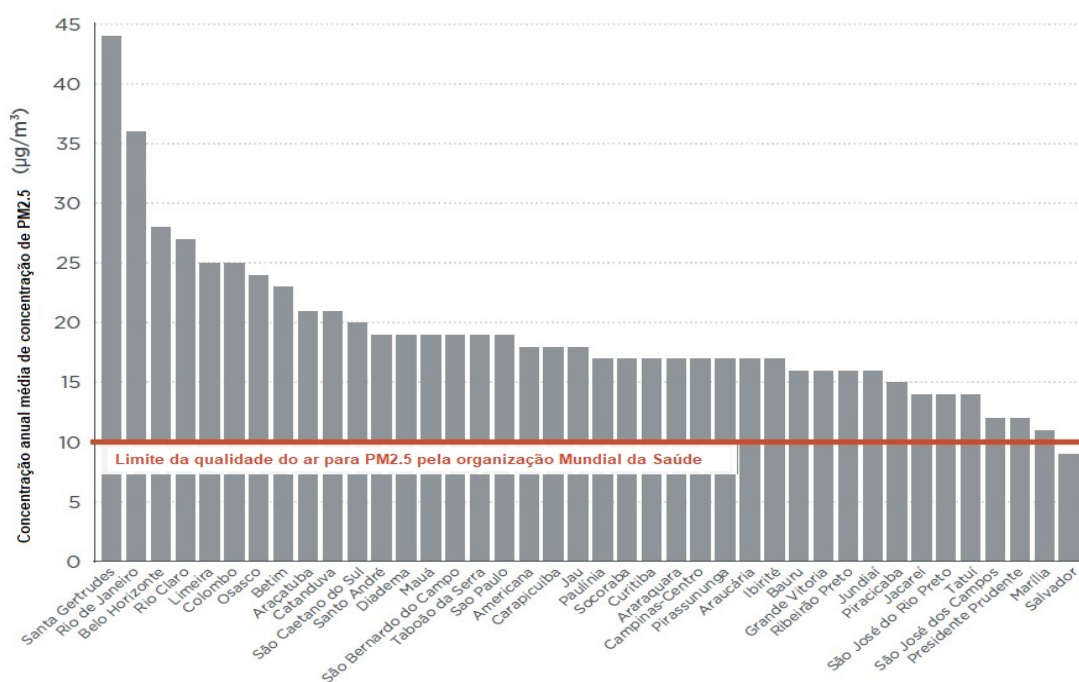
Figura 2 – Emissões globais de gases efeito estufa para o ano de 2015



Fonte:(U.S. ENVIROMENTAL PROTECTION AGENCY, 2017)

No Brasil, os veículos automotivos são uma das maiores fontes de contaminação do ar atmosférico. O primeiro programa brasileiro para o controle da poluição do ar de veículos movidos a motores de combustão interna, PROCONVE, surgiu em 1986 por meio da resolução N° 18/1986 do Conselho Nacional de Meio Ambiente (CONAMA) (DALLMANN; FAÇANHA, 2017). Os objetivos desse programa foram: fomentar ações para a redução de emissão de poluentes, incentivar avanços no desenvolvimento tecnológico do país, buscar melhorias na qualidade dos combustíveis, gerar novos programas de monitoramento dos veículos, conscientizar a população a respeito da poluição (JOSEPH, 2009). Desde então o PROCONVE passou por seis fases de implementação, sendo a última no ano de 2009. Esse programa baseou-se em modelos similares feitos nos Estados Unidos e Europa consistindo em aplicar limites para taxas de emissão de poluentes específicos. Fabricantes de veículos passaram então a ser obrigados a comprovar por meio de testes de laboratório regulamentados a adequação de seus produtos aos objetivos estabelecidos. Desde a implementação desse programa, os limites de redução de compostos como CO, HC e  $NO_x$  foram reduzidos em 95%. No entanto, a emissão de particulados e compostos orgânicos voláteis (VOC), precursores da formação de ozônio troposférico, ainda representam os maiores desafios. Esses compostos não sofreram redução significativa nos últimos dez anos e só em 2015 foram estimadas 3109 mortes causadas pela poluição do ozônio. Os níveis de emissões de particulados, conforme mostrado na Figura 3 para quarenta cidades brasileiras, estão acima do limite de  $10\mu\text{m}/\text{m}^3$  recomendado pela organização mundial da saúde (DALLMANN; FAÇANHA, 2017).

Figura 3 – Emissões de particulados em cidades brasileiras



Fonte: (DALLMANN; FAÇANHA, 2017)

Em comparação com as regulamentações atuais de emissão dos Estados Unidos e Europa, o Brasil ainda precisa de avanços na implementação de limites de emissão de particulados e espécies oxigenadas, que para motores de combustão interna ainda não são regulamentadas. Os limites de emissão de  $\text{NO}_x$  são 33% maiores que a norma europeia Euro 6 e duas vezes maior que a norma americana. Para CO, os limites se diferenciam entre 23% e 50% da norma americana e é maior que a europeia. Para aldeídos, os limites não são comparáveis uma vez que essas emissões assim como particulados do etanol não são regulamentados no Brasil (DALLMANN; FAÇANHA, 2017).

Desde a implementação do PROCONVE surgiram muitas iniciativas afim de tornar os veículos produzidos no país mais competitivos. Nesse contexto, o governo brasileiro anunciou em abril de 2012 o "Programa de Incentivo à Inovação Tecnológica e Adensamento da Cadeia Produtiva de Veículos Automotores - INOVAR AUTO", terminado em dezembro de 2017 (LEÃO; GOULART, 2012). Este programa teve como finalidade incentivar as empresas do setor automotivo a investirem em pesquisa e desenvolvimento (P&D), inovação, engenharia local, tecnologia industrial básica, capacitação de fornecedores, produção nacional, conteúdo nacional e eficiência energética (FILHO et al., 2013). A partir dessa iniciativa também surgiram parcerias entre empresas do setor e universidades. Nesse contexto, foi criado em 2016 o "Programa de Residência Tecnológica para Engenheiros" pela Fiat Chrysler Automobiles (FCA), cujo objetivo é estimular a pesquisa e inovação através da parceria com estudantes de pós-graduação, nível mestrado, com dedicação exclusiva, para desenvolver junto aos profissionais de engenharia da empresa pesquisas em temas pertinentes a sua demanda (SOUZA; MASSARANI, 2016). O presente trabalho faz parte dessa iniciativa.

Em julho de 2018, o governo brasileiro anunciou uma Medida Provisória que traz as bases para o programa Rota 2030, o qual substitui o INOVAR AUTO. Este novo programa tem duração prevista de 15 anos e se inicia em 2019. Além disso, são definidas metas obrigatórias de eficiência energética, segurança veicular e de investimento em P&D. No campo de eficiência energética, tem-se como meta a redução de 11% nas emissões de poluentes e consumo de combustível (BENJAMIN, 2018).

No que diz respeito ao aumento da eficiência energética, muitas tecnologias foram desenvolvidas tendo em vista a melhoria dos parâmetros de combustão. Das tecnologias importantes desenvolvidas pode-se destacar o *downsizing* dos MCI's e a injeção direta de combustíveis. Essas tecnologias combinadas são capazes de entregar uma alta potência de saída com reduzido consumo de combustível e menores perdas por bombeamento e redução da ocorrência do fenômeno da detonação (PETITJEAN D.; BERNARDINI, 2004). O uso de combustíveis alternativos foi uma das soluções encontradas para a redução da emissão de poluentes e a dependência dos combustíveis de origem fóssil. Nesse contexto, o uso do etanol como combustível puro ou como aditivo à gasolina tem-se mostrado

uma alternativa eficiente e no Brasil, tem-se condições climáticas favoráveis ao cultivo da cana de açúcar, matéria prima para a produção desse biocombustível. A produção do etanol no país começou nos anos 70 e encontrou desafios tais como: a sazonalidade dessa matéria prima, que leva a uma variação de preços muito alta, e a substituição do cultivo de cana como alimento para servir como combustível (SOARES, L. H. de B.; ALVES, B. J. R.; URQUIAGA, S.; BODDEY, 2009). No entanto, propriedades desse combustível tais como: calor latente de vaporização e octanagem, que em comparação com a gasolina são significativamente maiores, conferem a ele uma menor tendência a detonação e maiores razões volumétricas de compressão (DELGADO; ARAUJO; FERNANDES, 2007). Esse combustível também apresenta menores emissões de  $CO_2$  em todo o ciclo de vida (SOARES, L. H. de B.; ALVES, B. J. R.; URQUIAGA, S.; BODDEY, 2009).

Atualmente, a gasolina disponível para os consumidores nos postos de abastecimento brasileiros, Gasolina tipo C, contém 27% em volume de etanol. Concentração regulamentada pelo Governo Federal através do Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento, conforme a portaria N75 e Resolução N1 do Conselho Interministerial de Açúcar e do Álcool, ambas de março de 2015 (AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, 2018). Sendo esse combustível de alto consumo e visto como uma possibilidade de adequar a frota brasileira de veículos automotivos às normas ambientais, nacionais e internacionais, o estudo do comportamento físico-químico da combustão do etanol hidratado e de misturas de gasolina e etanol em motores a combustão interna é muito importante.

Dentre os métodos de análises desse comportamento, destaca-se a simulação numérica como uma ferramenta importante que permite acompanhar os processos que ocorrem simultaneamente dentro de um motor de combustão interna de forma que métodos experimentais não são capazes (BAUMGARTEN, 2006). Versteeg e Malalasekera (2007) afirma que o método dos volumes finitos é uma ferramenta de baixo custo capaz de fornecer dados sobre o comportamento desses processos. Um dos métodos para simular numericamente os processos envolvidos na combustão consiste no uso de mecanismos cinéticos químicos de reação, o qual dependendo do nível de detalhamento exigem um grande esforço computacional. Assim, é vantajoso a utilização de mecanismos cinéticos reduzidos, que são compostos por reações elementares e espécies chave capazes de representar o comportamento do combustível nas diferentes condições de operação dos motores. Neste contexto, este trabalho tem como objetivo avaliar o mecanismo cinético químico reduzido desenvolvido por Cota (2018) no que se refere a predição qualitativa de emissões de poluentes para misturas de gasolina e etanol em diferentes proporções. Essa análise teve por base dados experimentais obtidos de banco de dados do Centro de Tecnologia da Mobilidade da UFMG (CTM-UFMG) de ensaios experimentais de um motor monocilíndrico de pesquisa.

## 1.1 Objetivo Geral

Este trabalho tem como objetivo geral, avaliar o mecanismo cinético químico reduzido composto por 75 espécies e 343 reações aplicado a modelos computacionais tridimensionais de um motor de combustão interna. Nesses modelos, são analisadas as tendências de emissões de poluentes específicos:  $NO_x$ ,  $CO_2$ , CO e HC. Além disso, os mecanismos cinéticos químicos são aplicados na combustão de diferentes misturas de etanol e gasolina (E22, E50, E85 e E100).

### Objetivos específicos

O presente estudo tem os seguintes objetivos específicos:

- Validação do domínio computacional com base em razão de equivalência média e massa de ar aprisionada no cilindro.
- Seleção dos parâmetros de injeção de combustível e dos modelos de atomização do combustível disponíveis no programa;
- Avaliação da formação de mistura ar-combustível e do modelo de evaporação do combustível avaliando o parâmetro de difusividade mássica do combustível;
- Avaliar a predição de emissões pelo mecanismo cinético químico verificando quais misturas de gasolina e etanol foram melhor representadas;
- Comparar as tendências de emissões com a literatura.

## 2 REVISÃO DA LITERATURA

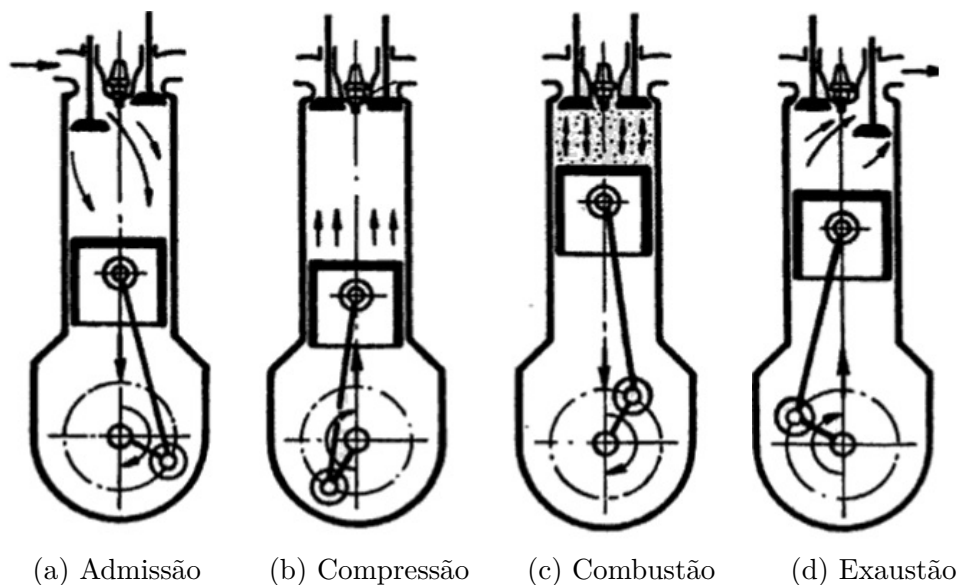
Este capítulo apresenta uma revisão da literatura consultada para a elaboração do presente trabalho e está dividida em duas partes. A primeira parte consiste na apresentação dos princípios fundamentais do processo de combustão e formação de poluentes em motores de combustão interna, combustíveis e análise fluido-dinâmica computacional aplicada a motores. A segunda parte consiste em um resumo de estudos relevantes que representam o estado da arte na predição de poluentes por modelos computacionais e o uso de mecanismos cinéticos químicos aplicados à análises computacionais fluido-dinâmicas.

### 2.1 Fundamentos Teóricos

#### 2.1.1 Ciclo real para Motores de Combustão Interna

Os motores de combustão interna (MCI) baseados neste ciclo são denominados de motores de ignição por centelha. Eles foram primeiramente fabricados em 1876 e tem por característica a transmissão de potência pelo movimento cíclico do pistão, que é impulsionado pela combustão e expansão dos gases queimados dentro do cilindro (HEYWOOD, 1988). Tal movimento descreve um ciclo mecânico de quatro tempos, sendo estes: admissão, compressão, expansão e exaustão. Cada tempo corresponde a um deslocamento angular de  $180^\circ$  do eixo virabrequim e estão representados na Figura 4.

Figura 4 – Os quatro tempos dos motores de ignição por centelha



(a) Admissão

(b) Compressão

(c) Combustão

(d) Exaustão

Fonte: Adaptado de (GIACOSA, 2000)



O tempo de admissão, Figura 4.a, corresponde ao deslocamento do pistão do ponto morto superior (PMS) para o ponto morto inferior (PMI) com a válvula de admissão aberta e a de exaustão fechada. Com o aumento do volume interno do cilindro, tem-se uma diferença entre sua pressão interna e a pressão atmosférica que resulta no preenchimento do cilindro com mistura ar-combustível. A injeção de combustível pode ser feita por injetores nos pórticos (injeção indireta com sigla PFI do inglês *Port Fuel Injection*) ou diretamente dentro do cilindro, que é chamada de injeção direta cuja sigla é DI proveniente do inglês *Direct Injection*. Para maximizar o preenchimento do cilindro aproveitando a inércia dos gases na admissão, a válvula de admissão é aberta antes do PMS e é fechada após o PMI, quando se inicia o ciclo de compressão (HEYWOOD, 1988).

No tempo de compressão, Figura 4.b, o pistão move-se do PMI para o PMS elevando a pressão e a temperatura da mistura. Pouco antes do PMS, ocorre a ignição da mistura por uma centelha elétrica e então é iniciada a combustão. Neste processo, uma chama turbulenta se propaga a partir do eletrodo até as paredes do cilindro fornecendo a energia necessária para as reações de oxidação do combustível pelo ar. A combustão termina no início do ciclo de expansão e eleva a temperatura e a pressão no cilindro aos seus valores máximos. Geralmente, os motores movidos à gasolina atingem a máxima eficiência de combustão quando esta se inicia entre 10 e 40 graus antes do ponto morto superior (APMS) e a cerca de 10 graus depois do PMS (DPMS) ela já se encontra na metade sendo terminada entre 30 e 40 graus DPMS (HEYWOOD, 1988).

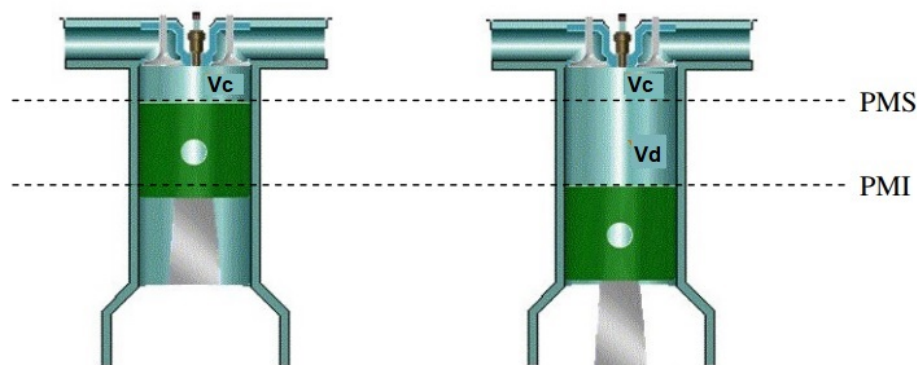
No tempo de expansão, também representado na Figura 4.c, com a válvula de exaustão fechada, o pistão se move do PMS de volta ao PMI impulsionado pelos gases que se expandem devido a alta pressão gerada pela combustão, convertendo assim parte da energia química liberada na combustão em trabalho mecânico. Antes que o pistão chegue ao PMI, a válvula de exaustão é aberta e os gases são expulsos do cilindro devido a alta pressão, processo conhecido como *blowdown*. Este procedimento reduz o trabalho de bombeamento do motor, embora haja perda de eficiência térmica devido esses gases possuírem entalpia elevada.

No tempo de exaustão, Figura 4.d, o pistão se move do PMI para o PMS expulsando do cilindro os gases queimados remanescentes do *blowdown*. Pouco antes do pistão atingir o PMS, a válvula de admissão começa a ser aberta novamente enquanto a válvula de exaustão é completamente fechada após o PMS. Assim, tem-se um período de funcionamento do motor em que as válvulas de admissão e exaustão encontram-se abertas simultaneamente, que é denominado de cruzamento de válvulas, cujo objetivo é auxiliar a entrada de mistura fresca de ar-combustível no cilindro (HEYWOOD, 1988).

### 2.1.2 Razão Volumétrica de Compressão

A razão volumétrica de compressão é um parâmetro importante na definição da geometria básica de um motor e consiste na razão entre o volume máximo e o volume mínimo do cilindro. Na Figura 5, pode-se observar que o volume mínimo ocorre com o pistão no PMS e corresponde ao volume da câmara de combustão ( $V_c$ ). O volume máximo corresponde a soma de  $V_c$  mais o volume deslocado quando o pistão é movido do PMS ao PMI (HEYWOOD, 1988):

Figura 5 – Indicação dos volumes máximos e mínimos no cilindro: cilindro com o pistão no PMS à esquerda e no PMI à direita



Fonte: (BAETA, 2006)

A razão volumétrica de compressão é então dada por:

$$r_c = \frac{V_d + V_c}{V_c} \quad (2.1)$$

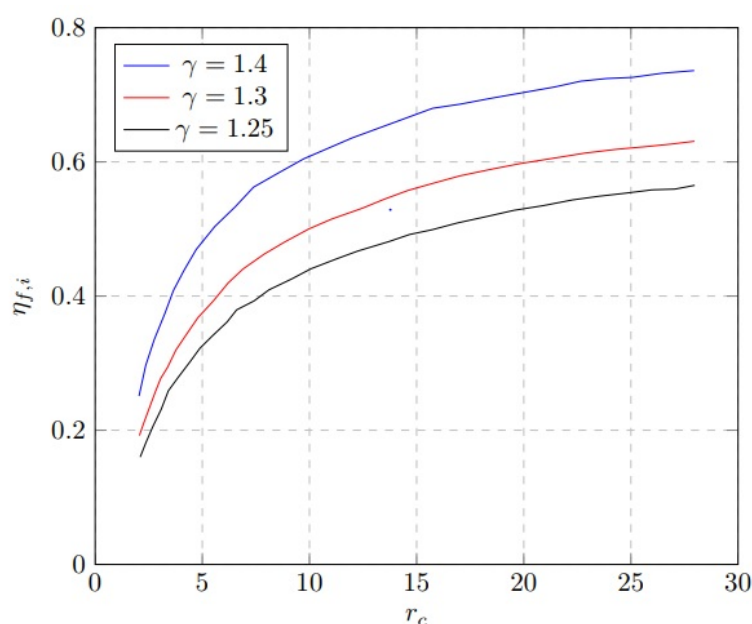
Este parâmetro tem grande influência na eficiência térmica e na pressão média efetiva em MCI's. Para entender sua importância, pode-se tomar o ciclo teórico OTTO como base. Considerando o calor específico a pressão constante ( $c_p$ ), o calor específico a volume constante ( $c_v$ ) com valores fixos e  $\gamma = c_p/c_v$ , a eficiência térmica do ciclo teórico em função da razão volumétrica de compressão é calculada segundo a equação 2.2 (GIACOSA, 2000):

$$\eta_{f,i} = 1 - \frac{1}{r_c^{\gamma-1}} \quad (2.2)$$

A Figura 6 ilustra o comportamento da eficiência térmica do ciclo teórico em função de  $r_c$  considerando diferentes valores de  $\gamma$ , que corresponde ao coeficiente adiabático de expansão do fluido de trabalho (HEYWOOD, 1988). O aumento da razão volumétrica de compressão resulta em maiores pressões e temperaturas no cilindro no processo de combustão e como será discutido posteriormente, isso tem grande influência na formação

de óxidos nitrosos ( $NO_x$ ) e hidrocarbonetos (HC). Nessa Figura, também observa-se que a eficiência térmica diminui com o decréscimo de  $\gamma$ . Nos ciclos reais, entretanto, o ganho em eficiência térmica é limitado pelo aumento do atrito (BAETA, 2006), ocorrência de fenômenos de combustão anormais tais como: pré-ignição e detonação, alteração na relação área-volume da câmara de combustão e no volume relativo de folga entre pistão e cilindro quando comparado ao volume da câmara de combustão (SEIXAS, 2017).

Figura 6 – Eficiência térmica para o ciclo ideal Otto



Adaptado de (HEYWOOD, 1988)

### 2.1.3 Pressão Média Efetiva

A pressão média efetiva é uma medida do desempenho de um motor dada em função do volume deslocado conforme a Equação 2.2:

$$mep = \frac{P n_r}{V_d N} \quad [kPa] \quad (2.3)$$

Em que P corresponde a potência em Watts,  $n_r$  revoluções do virabrequim para cada ciclo de potência por cilindro (sendo 2 para motores de quatro tempos e 1 para motores de dois tempos) e N a rotação do motor (rpm). A pressão média efetiva em função da potência medida por dinamômetro (bmep) é muito usada em comparações de desempenho de motores sendo resultado da combinação da eficiência volumétrica, razão de equivalência ar-combustível e eficiência de conversão de combustível (HEYWOOD, 1988).

## 2.1.4 Formação da Mistura Ar-Combustível

A formação da mistura ar-combustível é um processo de grande relevância para a combustão e emissões de poluentes em MCI. Serão abordados nesta seção parâmetros relevantes neste processo, tais como: tecnologias de injeção de combustível, razão de equivalência ar-combustível e propriedades do combustíveis etanol e gasolina.

### 2.1.4.1 Injeção Direta de Combustível

Atualmente, dois sistemas de injeção de combustível são empregados em MCI movidos à gasolina e biocombustíveis: sistema de injeção indireta (com sigla PFI do inglês *Port Fuel Injection*) e injeção direta (com sigla DI de *Direct Injection*). Em sistemas PFI, eletro-injetores são instalados nos dutos do coletor de admissão, onde é então formada a mistura ar-combustível. A injeção do tipo DI para motores movidos a gasolina, foi desenvolvida com o objetivo de se obter motores mais eficientes, com menor emissão de  $CO_2$ , custos menores no pós-tratamento das emissões e na fabricação dos sistemas de injeção. Neste sistema, os eletro-injetores são posicionados na câmara de combustão (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999). Por ser a tecnologia empregada no presente trabalho, a revisão será focada em suas principais características.

A injeção direta de combustível permite a operação com cargas homogêneas e estratificadas. Para formação de mistura homogênea, o combustível é injetado no cilindro na fase de admissão do ar e misturado a ele com a ajuda do escoamento dentro do cilindro e por difusão mássica (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999). Nesta condição, o consumo de combustível é próximo aos motores PFI. Entretanto, o potencial de redução de consumo de combustível é significativo para misturas estratificadas, em que a razão de equivalência local varia significativamente ao longo da câmara de combustão. Nesta condição, destacam-se duas estratégias: injeção de parte do combustível na fase de admissão e outra parte na fase de compressão da mistura, chamada de *Split Injection*, e injeção de combustível somente na fase de compressão da mistura (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999).

Destaca-se como vantagem desta tecnologia, a redução da temperatura da câmara de combustão devido a absorção de energia pelo combustível para passar para o estado vapor. Com isso, os motores se tornam capazes de operar com maiores razões volumétricas de compressão e assim, com maiores pressões de trabalho, tamanhos reduzidos (*downsizing*) e maior eficiência térmica. Além disso, reduz-se o risco da ocorrência de detonação (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999).

A possibilidade de se trabalhar com combustão de mistura estratificada na condição de carga parcial é uma das maiores vantagens da DI. Nesta condição, a mistura se forma com regiões mais ricas em combustível próximas à centelha (ZHAO; LAI; HAR-

RINGTON, 1999). A estratificação da carga também reduz a perda de calor para as paredes, pois a zona mais reativa é separada dessas regiões. As perdas por bombeamento também são minimizadas, pois a massa de ar admitida passa a ser controlada pela quantidade de combustível injetado (BAUMGARTEN, 2006). A economia de combustível também ocorre devido ao processo de *scavenging*, que consiste na lavagem dos gases dentro do cilindro, para as condições de baixa velocidade e carga total em que somente ar passa da admissão para o duto de exaustão. Em comparação com a injeção direta de diesel, a DI de misturas de gasolina e etanol exige menores pressões de injeção de combustível e sistemas de pós-tratamento mais simples (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999).

Com relação a emissão de poluentes, a tecnologia DI não tem um comportamento muito diferente da PFI para mistura homogêneas. Entretanto, comparando-se as emissões de  $\text{NO}_x$  para operação em mesma carga, pode ocorrer aumento devido a maiores temperaturas e pressões atingidas durante o processo de combustão. As emissões de HC são menores nas operações de partida e parada do motor devido à necessidade de menos ciclos para que se atinja uma condição estável de operação. Contudo, para misturas estratificadas, de modo geral, são maiores as emissões de HC e particulados. Os motivos para isso segundo Zhao, Lai e Harrington (1999) são:

- Possibilidade da chama se extinguir em regiões muito pobres em combustível;
- Formação de regiões muito ricas em combustível nas regiões próximas ao pistão;
- Diminuição das reações pós-chama devido a temperaturas mais baixas dentro da câmara de combustão e menor quantidade de combustível injetado;

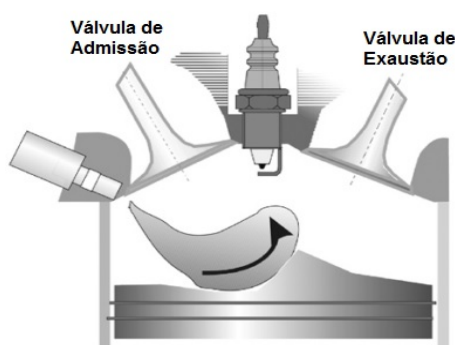
Estudos recentes demonstraram que motores DI são fontes importantes de emissões de particulados ultra-finos na atmosfera. Essas partículas, que tem tamanhos inferiores a 100 nm, potencializam a ocorrência de doenças respiratórias, cardiovasculares e neurodegenerativas. A formação desse poluente em motores DI é frequentemente associada na literatura ao menor tempo disponível para que o combustível seja evaporado e misturado aos gases dentro do cilindro depois de injetado na câmara de combustão (TAN et al., 2016).

Os três sistemas de combustão principais para DI são apresentados a seguir: *Wall-Guided*, *Air-Guided* e *Spray-Guided*. Também são apresentados os tipos de injetores de combustível empregados junto a essa tecnologia.

**Wall-Guided** Em sistemas *Wall-Guided*, a superfície do pistão é projetada para direcionar o combustível para a região da centelha, que é centralizada na câmara de combustão. O transporte da mistura também é realizado por escoamentos rotativos tais como: *tumble* e *swirl*, que serão discutidos posteriormente. Devido a grande quantidade de combustível

que atinge a superfície do pistão, ocorre formação de filme líquido e por isso, aumento da emissão de HC e CO. A forma geométrica do pistão é desfavorável também por contribuir para um menor desempenho em carga total do motor e grandes perdas de calor para parede. Esse sistema é ilustrado na Figura 7, sendo limitado a operação para baixas velocidades e cargas (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999; BAUMGARTEN, 2006).

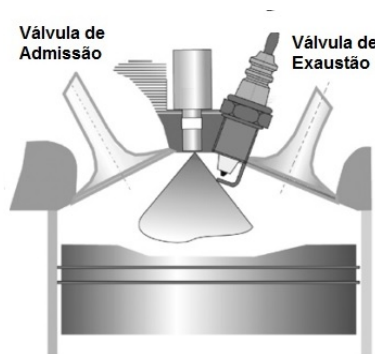
Figura 7 – Tecnologia de injeção de combustível *Wall-Guided*



Fonte: Adaptado de (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999)

***Spray-guided*** Para esta tecnologia, o injetor é posicionado próximo à centelha e ambos se encontram no centro da câmara de combustão. Com isso, o *spray* é transportado para a região da vela de ignição devido sua energia cinética e a formação da mistura é pouco influenciada pelo movimento da carga dentro do cilindro (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999). Entretanto, o tempo entre a injeção e a ignição do combustível é muito curto o que demanda pressões de injeções superiores a 20 MPa para que a formação de mistura não favoreça a emissão de particulados. Essas altas pressões elevam perdas por fricção e aumentam o desgaste dos injetores (BAUMGARTEN, 2006). Este sistema é apresentado na Figura 8.

Figura 8 – Tecnologia de injeção de combustível *Spray-Guided*



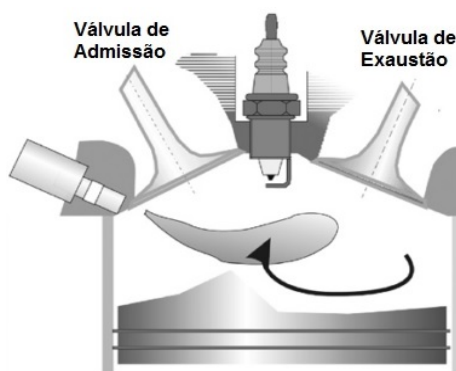
Fonte: Adaptado de (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999)

Outra vantagem do intervalo curto entre a injeção de combustível e a ignição da mistura é a possibilidade de variar o avanço de ignição para obter as melhores condições termodinâmicas no motor com o menor consumo de combustível. Contudo, o avanço de ignição é extremamente dependente do momento de injeção do combustível podendo ocorrer falha da ignição da mistura quando o intervalo de tempo entre eles não é preciso o suficiente ou ocorrer pré-ignição. Para evitar a pré-ignição da mistura, o momento de injeção deve ser atrasado a medida que se trabalha com cargas baixas. A perda de calor para as paredes nesta tecnologia assim como as perdas por bombeamento são menores, quando comparado a outras tecnologias de injeção direta, devido o *spray* de combustível não atingir as paredes e não ser necessário movimento forte da carga dentro do cilindro (BAUMGARTEN, 2006). Com isso, escoamentos como *tumble* e *swirl* dentro do cilindro podem ser especificados de forma a favorecerem a propagação de chama, e assim uma queima rápida da mistura (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999).

A tecnologia *Spray-guided* ainda apresenta desafios a serem superados. A proximidade do injetor de combustível e sistema de ignição demanda um posicionamento preciso para que a forma do *spray* não varie conforme são alterados os pontos de operação no mapa do motor e a mistura ar-combustível seja ignitável, pois se obtém um forte gradiente de concentração das espécies combustíveis nas regiões fora do *spray*. Outro problema que pode ocorrer do mau posicionamento, é o molhamento da centelha por combustível líquido o que eleva a formação de particulados (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999).

***Air-guided*** No sistema *Air-guided*, o combustível é injetado no escoamento de ar dentro do cilindro e transportado para a região da centelha pelo movimento da carga, conforme mostrado na Figura 9 (BAUMGARTEN, 2006). Neste caso, reduz-se o depósito de combustível nas paredes da câmara de combustão e assim, a emissão de HC é menor, quando comparado com a tecnologia *wall guided* (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999).

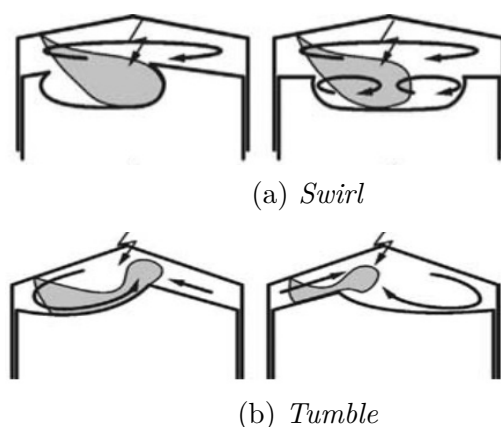
Figura 9 – Tecnologia de injeção de combustível *Air-Guided*



Fonte: Adaptado de (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999)

Para esta tecnologia, é importante garantir um movimento estável do escoamento dentro do cilindro afim de se obter a pluma de *spray* compacta durante o seu transporte para região da centelha. Além disso, na nuvem de combustível é desejável obter uma mistura homogênea. Assim, movimentos do fluido em larga escala, *tumble* e *swirl*, são importantes nesta tecnologia e são controlados pela geometria do pistão e dos pórnicos da admissão. A Figura 10 ilustra os escoamentos de grande escala e as geometrias possíveis da câmara de combustão e do pistão para a técnica *Air-Guided* (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999).

Figura 10 – Escoamentos de grande escala

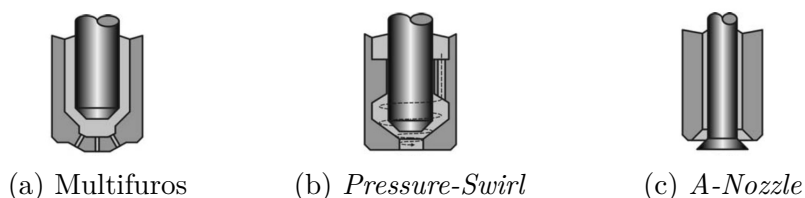


Fonte: Adaptado de (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999)

#### 2.1.4.2 Tipos de Injetores DI

Ao longo do desenvolvimento da tecnologia de injeção direta de gasolina, diferentes tipos de injetores de combustível foram desenvolvidos, dos quais se destacam: *pressure-swirl*, multifuros e injetor de abertura externa *A-Nozzles*. Esses injetores são apresentados na Figura 11.

Figura 11 – Geometrias de injetores de combustível de para motores DI



Fonte: Adaptado de (BAUMGARTEN, 2006)

Muito aplicado em motores Diesel, o injetor de combustível do tipo multifuros também tem sido utilizado em motores DI. Este injetor produz *sprays* compactos de alta penetração e gotas relativamente grandes. Tem-se assim, grandes gradientes de concentra-



ção de combustível no *spray* com zonas com excesso de combustível adjacentes à regiões empobrecidas. Essa não homogeneidade do *spray* pode resultar em diferentes velocidades de queima, favorecer a formação de particulados e  $NO_x$  assim como a frente de chama pode não propagar uniformemente pela câmara de combustão (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999). Uma grande vantagem dos injetores multifuros segundo Baumgarten (2006), consiste nos vários padrões de distribuição do combustível que podem ser produzidos de acordo com o número de furos permitindo que a combustão seja otimizada de acordo com as necessidades de projeto. Como desvantagens pode-se citar: entupimento por particulados e pressões de injeção altas para promover a atomização do combustível.

Por meio dos injetores do tipo *pressure-swirl* e de abertura externa (*A-Nozzles*), o combustível líquido é injetado de uma forma anular e forma um *spray* oco. Essa característica lhes confere uma melhor atomização do combustível e tamanho médio das gotas menores em relação ao *spray* de cone cheio devido a uma maior razão entre a área e o volume do *spray*. O que diferencia esses dois tipos de injetores entre si é a geometria dos bocais por onde é injetado o combustível na câmara de combustão (ZHAO; LAI; HARRINGTON, 1999).

No injetor *pressure-swirl*, a geometria do bocal induz um movimento rotacional do combustível durante a injeção que garante a formação do *spray* de cone oco (BAUMGARTEN, 2006). Segundo Zhao, Lai e Harrington (1999), este injetores tem como principais vantagens: boa qualidade de atomização, alta flexibilidade do *spray*, baixa sensibilidade a contaminação e a interferências mecânicas e térmicas. Normalmente esse tipo de injetor é usado com sistemas de combustão *wall-guided*. Dependendo da carga do motor e da pressão do gás circundante, a estrutura do *spray* é modificada e a otimização da combustão fica impossibilitada para injetores do tipo *pressure-swirl*. Entretanto, para injetores de abertura externa isso não acontece e não há formação de pré-*spray*.

#### 2.1.4.3 Razão de Equivalência Combustível-Ar

A razão de equivalência combustível-ar ( $C/A$ ) indica uma proporção entre a quantidade de combustível pela quantidade de ar na câmara de combustão com base na massa molar das espécies químicas. Essa razão é dita estequiométrica quando a proporção de oxigênio (contido no ar) é suficiente para que ocorra a oxidação completa das espécies combustíveis. Entretanto, para análise da combustão com misturas com razões acima ou abaixo da estequiometria é utilizado o parâmetro razão de equivalência combustível-ar ( $\phi$ ) dado pela Equação 2.4 (HEYWOOD, 1988).

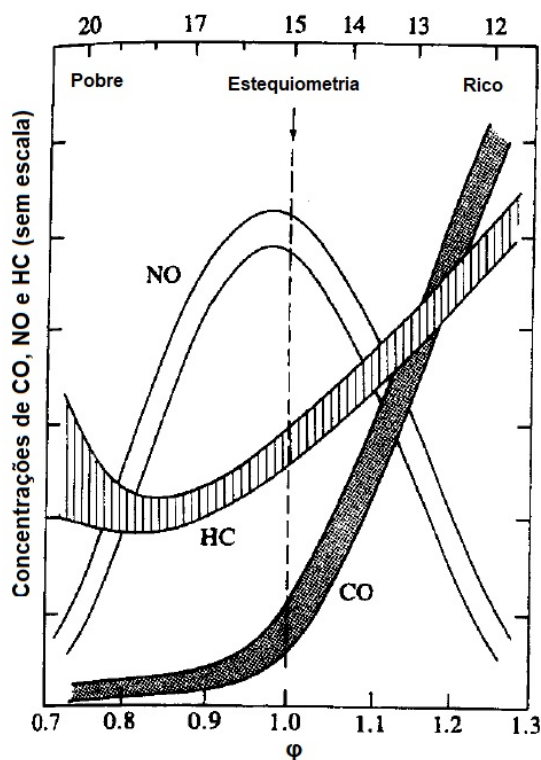
$$\phi = \frac{(C/A)_{atual}}{(C/A)_{esteq}} \quad (2.4)$$

Para misturas pobres em combustível  $\phi < 1$ , para misturas estequiométricas  $\phi = 1$

e para misturas ricas em combustível  $\phi > 1$ .

Em experimentos com MCI's, a razão de equivalência média na câmara de combustão é determinada pela medição da concentração das espécies contidas nos gases de exaustão. A composição desses gases depende das proporções relativas entre o combustível e sua composição e o ar, assim como se a combustão for completa ou não. Para motores com injeção direta de combustível, mesmo que operando na condição de carga homogênea, a mistura pode não se formar de maneira uniforme. A razão de equivalência local é então, um parâmetro importante na análise de emissões de poluentes, pois regiões com excesso de combustível ou muito empobrecidas favorecem a queima incompleta do combustível, aumentando as emissões de HC e CO. A Figura 12 ilustra a influência deste parâmetro nas emissões de  $NO_x$ , HC e CO e mostra que misturas empobrecidas diminuem os níveis de emissões contanto que a qualidade da combustão não seja comprometida. Além disso, para misturas ricas em combustível, as emissões de CO e HC são crescentes com a razão de equivalência. Nesta Figura é mostrada também que a emissão de NO é dependente da razão de equivalência, sendo mais favorecida em misturas levemente empobrecidas (HEYWOOD, 1988). A formação desses poluentes será discutida posteriormente.

Figura 12 – Relação entre razão de equivalência  $\phi$  e emissões



Fonte: Adaptado de (HEYWOOD, 1988)

#### 2.1.4.4 Turbulência

Sendo o escoamento em motores turbulento, a formação da mistura se dá principalmente pelo movimento do escoamento resultante das flutuações locais da velocidade do fluido. Além disso, o movimento da carga dentro do cilindro é determinante nos processos de transferência de calor e combustão. Escoamentos dessa natureza são sempre dissipativos devido a atuação de tensões cisalhantes viscosas que executam um trabalho de deformação no fluido e transformam sua energia cinética em energia interna. Sendo assim, para se gerar turbulência é preciso fornecer energia ao escoamento, o qual pode ser feito por indução de cisalhamento no escoamento médio que cria vorticidades e pela geometria do pistão e câmara de combustão (HEYWOOD, 1988).

O caráter de um escoamento turbulento depende do ambiente, sendo que em cilindros envolve uma combinação de camadas cisalhantes, recirculação da carga e camada limite. Podem ser gerados movimentos de pequena ou grande escala, que são fatores que definem o comportamento do escoamento. As maiores escalas de comprimento são limitadas pelas fronteiras do sistema enquanto as menores são limitadas pela difusividade molecular (HEYWOOD, 1988). Os comprimentos característicos de maior relevância, segundo Turns (2013) são:

- $L$  - Comprimento característico do escoamento em macroescala;
- $l_o$  - Escala integral ou turbulência em em macroescala;
- $l_\lambda$  - Microescala de Taylor;
- $l_K$  - Microescala de Kolmogorov.

O comprimento característico do escoamento em macroescala em MCI corresponde à distância entre o topo do pistão e o cabeçote ou ao diâmetro do pistão. É usado para definir o número de Reynolds baseado na velocidade média. Uma característica importante do escoamento turbulento é a aleatoriedade. Assim, métodos estatísticos são usados para determinar o campo de escoamento e as grandezas usadas para isso são: a velocidade média ( $U$ ), velocidade de flutuação em torno da média ( $u'(t)$ ), e escalas de comprimento e tempo. Em escoamentos turbulentos com combustão, ocorre também flutuações na temperatura, densidade e espécies também expressas como a soma da média e a componente de flutuação (TURNS, 2013). Essas equações, conhecidas como decomposição de Reynolds,

são apresentadas na equação 2.5 :

$$\begin{aligned}
 U(t) &= \bar{U} + U'(t) \quad [m/s] \\
 T(t) &= \bar{T} + T'(t) \quad [K] \\
 \rho(t) &= \bar{\rho} + T'(\rho) \quad [kg/m^3] \\
 Y_i(t) &= \bar{Y}_i + Y'_i(t) \quad [mol]
 \end{aligned}
 \tag{2.5}$$

Independentemente de como a velocidade varia dimensionalmente, a flutuação sempre possui componentes em três dimensões. Na equação 2.5, de forma análoga a como foi aplicada a decomposição de Reynolds para a velocidade, estão descritas as equações para a temperatura ( $T$ ), a massa específica da mistura ( $\rho$ ) e espécies químicas ( $Y_i$ ).

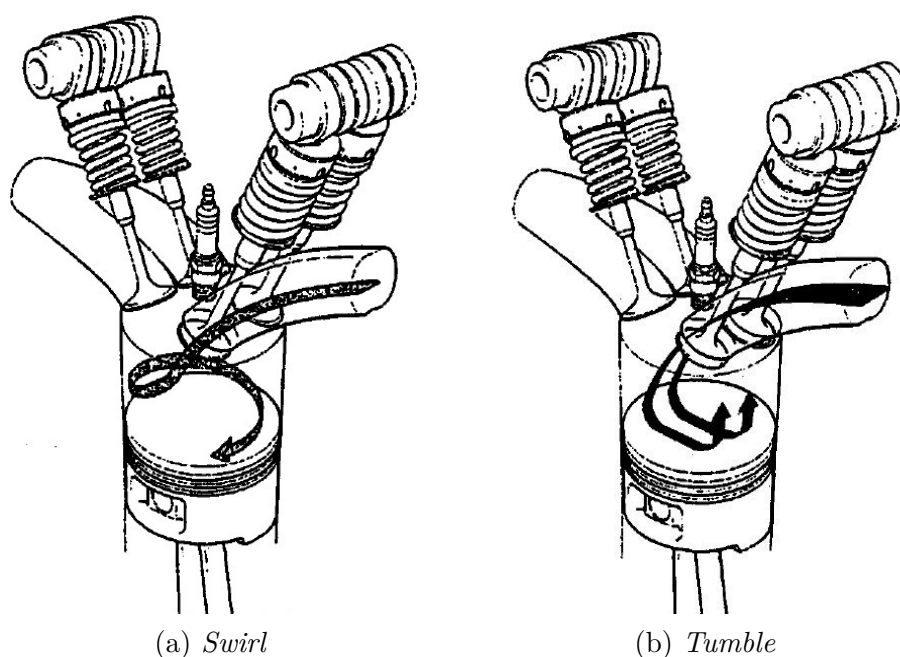
Na fase de admissão, as maiores velocidades do ar se encontram nas válvulas quando abertas, onde o jato de ar se desprende do assentamento da válvula e gera turbulência devido as regiões de recirculação abaixo delas e em regiões com quinas. Esses movimentos em grande escala da carga também são produzidos pela interação dos jatos da admissão com as paredes do cilindro e são dependentes das geometrias dos dutos de admissão, válvulas e cabeçote do cilindro. Escoamentos gerados pela recirculação da carga, tem sua velocidade proporcional à velocidade do pistão e são, geralmente, mais sensíveis a variações no escoamento. Além disso, se tornam instáveis facilmente e se quebram em outros movimentos turbulentos tridimensionais, sendo dissipados no processo de compressão. Entretanto, no final da fase de compressão, a turbulência é mais significativa na formação da mistura ar-combustível e taxas de queima da mistura. Durante a fase de compressão e combustão, com o aumento da pressão dentro do cilindro, a mistura não queimada é comprimida e as propriedades da turbulência mudam significativamente. Caso a compressão ocorra rapidamente, aumenta-se a intensidade dos vórtices e da turbulência (HEYWOOD, 1988).

### 2.1.5 Movimentos da Carga em Grande Escala

Movimentos de rotação do fluido em grande escala, tais como: *tumble* e *swirl*, apresentados na Figura 13, podem ser introduzidos dentro do cilindro para aumentar a velocidade em que a combustão ocorre e aumentar o limite de flamabilidade da mistura ar-combustível. Isso ocorre porque esses escoamentos rotativos aumentam a intensidade de turbulência dentro do cilindro. O *swirl*, consiste em uma rotação organizada do fluido ao redor do eixo do cilindro induzida pela admissão de uma carga com momento angular inicial. *Tumble* é o movimento do fluido perpendicular ao eixo do cilindro (HILL; ZHANG, 1994). As vantagens de introduzir escoamentos rotativos no cilindro, de acordo com Hill e Zhang (1994) são:

- Conversão mais eficiente da energia térmica em mecânica;
- Possibilidade de trabalhar com maior razão volumétrica de compressão e eficiência utilizando combustíveis com alta octanagem, mas com baixa velocidade de queima;
- limites de flamabilidade podem ser expandidos o que permite trabalhar com misturas empobrecidas e temperaturas de pico mais baixas, reduzindo as emissões de  $NO_x$ .

Figura 13 – Tipos de escoamentos em grande escala



Fonte: Adaptado de (LUMLEY, 1999)

Entretanto, fluidos rotativos podem levar ao aumento da perda de calor para as paredes por convecção, a perda de eficiência volumétrica causada pela perda extra de pressão durante a admissão e aumento da temperatura da carga devido a transferência de calor para as paredes. Também pode aumentar o nível de ruídos devido a aumento dos picos de pressão. Com isso, esses escoamentos devem ser induzidos de acordo com as condições de operação do motor (HILL; ZHANG, 1994).

A energia turbulenta do *swirl* é em parte dissipada pela fricção da carga com a parede do cilindro e por dissipação turbulenta no próprio fluido, mas geralmente persiste após a fase de compressão, combustão e expansão dos gases. Esta estrutura é aplicada a MCI's que trabalham com carga estratificada para promover uma mistura mais rápida do ar com o combustível injetado e também aumentar a velocidade de queima da mistura. Para se produzir *swirl*, o fluido pode ser admitido no cilindro tangencialmente as paredes ou forçado a se mover em torno do eixo da válvula antes de entrar na câmara de combustão. A velocidade de *swirl* pode ser aumentada durante a fase de compressão com o projeto

adequado da câmara de combustão e na fase de admissão direcionando o escoamento de ar para um pistão com *bowl*. A geração de *swirl* sempre é acompanhada de *tumble*, embora este consiga ser produzido sem a presença de *swirl* (LUMLEY, 1999). *Tumble* é o movimento da carga induzido pelas válvulas de admissão, cujo raio de sua trajetória é reduzido pelo movimento do pistão durante a fase de compressão, Figura 13.b.

*Squish* é também um escoamento em grande escala que descreve um movimento transversal ou em torno do eixo do cilindro produzido no final da fase de compressão pela aproximação da face do pistão do cabeçote do cilindro (HEYWOOD, 1988). Esse movimento pode servir para intensificar o *swirl* e aumentar a turbulência na fase inicial da combustão (LUMLEY, 1999). Esse escoamento é dependente da geometria da câmara de combustão sendo produzido em câmaras de combustão compactas (HEYWOOD, 1988).

### 2.1.6 Combustíveis

Os veículos automotivos brasileiros são predominantemente movidos por motores de ignição por centelha ou motores de ignição por compressão cujos principais combustíveis estão relacionados na Tabela 1 (AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, 2018). Outros combustíveis alternativos empregados em uma pequena parcela do mercado automotivo do país são: metanol, gás natural e hidrogênio (BAETA, 2006). Nessa seção, são apresentadas as características dos combustíveis empregados no presente trabalho.

Tabela 1 – Combustíveis mais utilizados no Brasil

Tipo de combustível	Descrição
Gasolina A	Combustível derivado de petróleo, vendida pelos produtores e importadores de gasolina.
Gasolina C	Mistura de gasolina e etanol anidro. Atualmente, a porcentagem de etanol nessa mistura regulamentada pela ANP é de 27% em volume.
Etanol Hidratado	Biocombustível derivado principalmente da fermentação da cana-de-açúcar com conteúdo de água <7,4% em volume
Diesel	Combustível derivado de petróleo banido para veículos com capacidade de carga menor que 1000 Kg no Brasil.
Biodiesel	Biocombustível derivado de óleos vegetais ou gordura animal por processo de transesterificação, que tem por principal matéria-prima no Brasil o óleo de soja.

Fonte: (AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, 2018)

#### 2.1.6.1 Gasolina

A Gasolina consiste em uma mistura complexa de hidrocarbonetos relativamente voláteis que podem variar de 5 a 12 carbonos e pode ser obtida pela destilação fracionada

do petróleo em refinaria ou por processos químicos complexos, tais como: craqueamento catalítico ou reforma e por formulação, que é a mistura mecânica de hidrocarbonetos líquidos. Propriedades médias desse combustível são apresentadas na Tabela 2.

Segundo [Heywood \(1988\)](#) e [Pulkrabek \(1997\)](#), dos compostos orgânicos que são encontrados na gasolina, destacam-se:

- Parafinas

Cadeias abertas saturadas de carbono e hidrogênio que possuem fórmula química geral  $C_nH_{2n+2}$ . Exemplos: Propano ( $C_3H_8$ ), isoctano ( $C_8H_{18}$ )

- Ciclo-parafinas

Cadeias cíclicas de hidrocarbonetos com ligações simples tais como: ciclo-propano ( $C_3H_6$ ), ciclo-butano ( $C_4H_8$ ) e o ciclo-pentano ( $C_5H_{10}$ )

- Olefinas

Compostos com cadeias abertas de hidrocarbonetos contendo uma ligação dupla com fórmula química geral  $C_nH_{2n}$ . São exemplos desse grupo: o eteno ( $C_2H_4$ ) e propeno ( $C_3H_6$ ).

- Acetileno

Cadeia aberta insaturada de hidrocarbonetos contendo uma ligação tripla entre carbonos com fórmula química geral  $C_nH_{2n-2}$

- Aromáticos

Estruturas anelares insaturadas com ligações duplas entre carbonos e fórmula química geral  $C_nH_{2n-6}$ . Exemplos: benzeno ( $C_6H_6$ ) e o tolueno ( $C_7H_8$ ). Os compostos aromáticos possuem alta densidade no estado líquido e alto conteúdo energético por unidade de volume.

- Álcool

Cadeias de carbono e hidrogênio com radical hidróxilo (OH). Exemplos: metanol ( $CH_3OH$ ) e etanol ( $C_2H_5OH$ )

#### 2.1.6.2 Etanol

O etanol, é um biocombustível com fórmula química  $C_2H_5OH$  que se apresenta na forma de um líquido incolor. Este combustível pode ser obtido pela hidratação do etileno, redução de acetaldeído ou a partir da fermentação de biomassa. Assim, ele é visto como um recurso energético renovável que pode ser desenvolvido de forma sustentável ([MASUM et al., 2013](#); [VAZ, 2013](#)).

No Brasil, o etanol é produzido principalmente a partir da fermentação da cana de açúcar e o país apresenta relativa maturidade no uso de biocombustíveis. Em novembro de 1975, foi estabelecido o Programa Nacional do Álcool (Proálcool), o qual tinha por objetivo reduzir a dependência do país da importação de petróleo o substituindo por álcool. Com isso, o governo brasileiro esperava manter acelerado o crescimento econômico que o país viveu em anos antecessores. A partir dessa medida, a indústria automotiva foi mobilizada a mitigar as desvantagens do uso deste combustível para atender o mercado interno de veículos. Em 2003, a produção de etanol teve um novo impulso com o lançamento dos carros bicompostíveis, cujos MCI's são capazes de operar tanto com etanol quanto com gasolina ou mistura de ambos em qualquer proporção (VAZ, 2013).

Com normas cada vez mais restritas em relação a emissão de gases efeito estufa e da crescente demanda mundial energética, o etanol se destaca como substituto potencial dos combustíveis de origem fóssil. Na literatura, estudos afirmam que o uso do etanol de cana de açúcar como combustível tem menores emissões de  $CO_2$  em seu ciclo de produção e consumo (MASUM et al., 2013; TAN et al., 2016; DELGADO; ARAUJO; FERNANDES, 2007; KOHSE-HÖINGHAUS et al., 2010). Segundo Masum et al. (2013), as principais vantagens do etanol em relação a gasolina são:

- Maior octanagem e alta resistência a detonação. Com isso, tem-se maior razão volumétrica de compressão;
- Alto calor latente de vaporização, o que aumenta a eficiência volumétrica;
- Etanol fornece mais oxigênio à reação de combustão, melhorando a eficiência de combustão;
- Maior limite de flamabilidade devido sua alta velocidade de propagação da chama;
- Maior eficiência térmica;
- Menor emissão de poluentes e menor teor de enxofre;
- Menor toxicidade.

Como desvantagens do etanol em relação à gasolina, destaca-se, (PULKRABEK, 1997):

- Baixo conteúdo de energia (cerca de 1/3 menor que a gasolina) e por isso, mais combustível é necessário para que uma mesma potência seja gerada;
- Emissão de aldeídos;



- Mais corrosivo quando em contato com cobre, alumínio, borracha e plásticos o que restringe os materiais que podem usados na fabricação de motores e seus componentes;
- Dificuldade de partida a frio devido a baixa pressão de vapor.

A Tabela 2 apresenta uma comparação das propriedades físico-químicas médias da gasolina e etanol (MASUM et al., 2013).

Tabela 2 – Comparação entre as propriedades físico-químicas médias da gasolina e etanol

Propriedade	Unidade	Gasolina	Etanol
Fórmula química	-	$C_5 - C_{12}$	$C_2H_5OH$
Peso molecular	$kg.kmol^{-1}$	114,15	46,07
Massa específica (em 15°C)	$kg.m^{-3}$	750-765	785-809,9
Razão ar-combustível estequiométrica	$kg/kg$	14,2-15,1	8,97
Pressão de vapor Reid em 37,8°C	kPa	53-60	17
Octanagem (RON)	-	91-100	108,61-110
Temperatura de ebulição	°C	27-225	78
Temperatura de auto-ignição	°C	257	425
Limite de flamabilidade do vapor	vol%	0,6-8	3,5-15
Velocidade da chama laminar em 100 kPa, 325 K	cm/s	33	39
Solubilidade da água	%	0	100
Volume de aromáticos	%	27,6	0

Fonte: MASUM et al., 2013

### 2.1.6.3 Misturas de Gasolina e Etanol

O Proálcool no Brasil passou por duas fases: adição de etanol anidro à gasolina e a substituição completa da gasolina pelo etanol hidratado (VAZ, 2013). Atualmente, nos postos de combustíveis brasileiros é vendida a Gasolina Tipo C, que é regulamentada pela Resolução ANP n° 40/2013, a qual compreende o Regulamento Técnico ANP n°3/2013. Nesses documentos são especificadas as características físico-químicas e a metodologia para avaliação da adequação do combustível às normas regulamentadoras. A atual especificação da gasolina permite o teor de 27% em volume de etanol na mistura e está de acordo com a fase mais recente do Programa de Controle da Poluição do Ar por Veículos Automotores (PROCONVE L-6), que determinou limites mais restritivos para emissões de poluentes de MCI a partir do ano de 2014. O etanol vendido aos consumidores brasileiros, é regulamentado pela resolução ANP n° 19/2015 em que é permitido o teor em porcentagem de massa de até 7,5% de água no combustível (AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, 2018).

Na literatura, muitos estudos discutem a influência do teor de etanol na gasolina em diferentes proporções no processo de combustão. A adição de etanol à gasolina aumenta sua octanagem, densidade e calor latente de vaporização e decresce o poder calorífico, como mostrado na Tabela 3. Nesta Tabela, as misturas são nomeadas com E (etanol) seguido da porcentagem em volume de etanol da mistura, (E85 corresponde a 85% em volume de etanol na mistura, por exemplo) (MASUM et al., 2013).

Tabela 3 – Propriedades de misturas de gasolina e etanol

Propriedade	Unidade	E20	E50	E85
Massa específica	$kg/m^3$	764,5	751,0	
Pressão de vapor Reid em 37 °C	$kg.kmol^{-1}$	58,3	45,3	37,85
RON	-	100,7	101,2	101,70
Poder calorífico	MJ/kg	38,98-39,5	33,34	29,20
Temperatura para destilação:				
(a) Ponto inicial de ebulição	°C	36,7-38,6		
(b) 10 vol%	°C	51,3-52,8		73,90
(c) 50 vol%	°C	70,3-73,8		71,70
(d) 90 vol%	°C	165,2-163,0		78,70
(e) Ponto final de ebulição	°C	198,6-203,6		79,90

Fonte: MASUM et al., 2013

### 2.1.7 Emissões de Poluentes em MCI

Os gases emitidos por veículos automotivos correspondem a uma das principais fontes de poluição em áreas urbanas. Para MCI's movidos a gasolina e etanol, os principais poluentes, também chamados de poluentes primários, são: óxidos de nitrogênio ( $NO_x$ ), monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono ( $CO_2$ ), materiais particulados (PM) e hidrocarbonetos não queimados ou parcialmente queimados (HC). Também são encontrados nesses gases óxidos de enxofre ( $SO_x$ ), entretanto, para a gasolina as concentrações dessas espécies não são significativas (menor que 600 ppm/kg de combustível) (HEYWOOD, 1988).

Essas espécies afetam tanto o meio ambiente como a saúde humana em muitas maneiras. Na atmosfera, a emissão de particulados e  $NO_x$  reduz a visibilidade. A emissão de  $NO_x$  é também responsável pela formação de chuva ácida, que reduz a fertilidade dos solos e poluem lagos e rios. Particulados são também responsáveis por sujar prédios, roupas e demais estruturas. Na saúde humana, estes poluentes podem agravar doenças cardiorrespiratórias e provocar irritação nos olhos (JOHNSON, 2016). Nesta seção, são descritos os mecanismos de formação e decomposição desses poluentes durante os processos de combustão e exaustão sem considerar a presença de catalisadores.

### 2.1.7.1 Óxidos de Nitrogênio

Os óxidos de nitrogênio são compostos predominantemente pelas espécies: óxido nítrico (NO) e dióxido de nitrogênio (NO<sub>2</sub>), sendo NO mais abundante nos gases de exaustão dos motores de combustão interna em comparação com NO<sub>2</sub>. Quando expelido na atmosfera, o óxido nítrico reage com o ar e forma dióxido de nitrogênio (NO<sub>2</sub>), o qual é responsável pela produção de chuva ácida e de nevoeiro fotoquímico (TURNNS, 2013). NO é um gás incolor e inodoro e o dióxido de nitrogênio é corrosivo, tóxico de coloração marrom e avermelhada visível em altas concentrações (MASUM et al., 2013).

O NO é formado principalmente a partir da oxidação do nitrogênio atmosférico, uma vez que em combustíveis como a gasolina e o etanol se tem uma concentração extremamente baixa dessa espécie química (MASUM et al., 2013). Em MCI's os principais parâmetros que influenciam a formação desse poluente são: razão de equivalência combustível-ar ( $\phi$ ), a fração de gases queimados diluída na mistura não queimada dentro da câmara de combustão e o momento da ignição (HEYWOOD, 1988). A partir do nitrogênio atmosférico, os mecanismos químicos que descrevem a formação de NO e se destacam para MCI's são: o mecanismo estendido de Zeldovich e o mecanismo de Fenimore. O mecanismo estendido de Zeldovich, também conhecido por mecanismo térmico, é dominante em combustão à altas temperaturas em ampla faixa de razões de equivalências. Por sua vez, o mecanismo imediato (Fenimore) é relevante para combustão de misturas ricas em combustível (TURNNS, 2013).

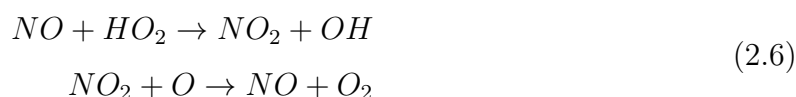
Dos parâmetros que se destacam na formação de NO e comparando-se misturas ricas e pobres em combustível, a concentração de NO na etapa de expansão dos gases dentro do cilindro se estagna mais cedo para misturas empobrecidas e a decomposição dessa espécie ocorre para uma fração pequena. Em misturas ricas, entretanto, ocorre decomposição significativa de NO a partir do momento em que se obtém a máxima pressão no cilindro, em que a concentração desse poluente também é máxima (HEYWOOD, 1988).

O uso da recirculação de gases da exaustão (EGR, do inglês *Exhaust gas recirculation*) é uma estratégia de controle da emissão de NO<sub>x</sub>, pois a temperatura de chama e a temperatura dos gases após a combustão dentro do cilindro tendem a diminuir pelo aumento da capacidade térmica da carga do cilindro. A fração de gases residuais no cilindro é controlada pela carga, curva de levantamento das válvulas de admissão e exaustão, rotação do motor,  $\phi$  e razão volumétrica de compressão. Entretanto, misturas com excesso de ar ou com excesso de gases queimados resultam em um processo de combustão instável e de baixa qualidade aumentando a emissão de outros poluentes como CO e HC (HEYWOOD, 1988).

Também relevante para a formação de NO<sub>x</sub>, o momento da centelha tem grande influência nas pressões de pico no cilindro. Para avanços de ignição adiantados, essas

pressões resultam em altas temperaturas de pico, e por isso, favorecem a formação de NO térmico. Emissões desse poluente decrescem quando a centelha é retardada em relação ao ponto de operação correspondente ao momento em que se atinge o torque máximo de eixo (MBT). No entanto, neste ponto de operação, não é possível uma determinação exata da emissão de  $\text{NO}_x$ , sendo necessário muito cuidado ao medir emissões nessa condição (HEYWOOD, 1988).

Segundo Heywood (1988), para gases queimados em temperaturas típicas de chama, a razão entre a concentração das espécies  $\text{NO}_2$  e  $\text{NO}$  é muito pequena para motores de combustão interna. A formação de  $\text{NO}_2$  ocorre quando moléculas de  $\text{NO}$  de regiões de alta temperatura migram para regiões ricas em  $\text{HO}_2$ , que se formam em regiões de baixas temperaturas, por meio de difusão ou advecção. Em altas temperaturas, a formação desse poluente é impedida (TURNS, 2013). As reações importantes para a formação e destruição de  $\text{NO}_2$  na zona da chama são:



#### 2.1.7.2 Monóxido de Carbono

Motores movidos à combustão correspondem a maior fonte de emissão de CO em áreas urbanas. Os efeitos deste poluente na saúde humana são associados principalmente as doenças cardiovasculares e cerebrais, devido a sua capacidade de reduzir a oxigenação do corpo pela sua alta afinidade com a hemoglobina, célula responsável pelo transporte de oxigênio pela corrente sanguínea. Essa redução de oxigênio no corpo tem por consequências: diminuição na capacidade de concentração, reflexos lentos e confusão mental (KAMPA; CASTANAS, 2008). Em motores, os principais parâmetros que definem a formação desse poluente são: formação de mistura e razão de equivalência ( $\phi$ ). A emissão deste poluente também se diferencia quando a combustão ocorre em pré-misturas e sistemas de combustão não pré-misturados (TURNS, 2013).

A reação de formação de CO é uma das principais etapas da combustão de hidrocarbonetos (TURNS, 2013). Segundo Heywood (1988), a reação química que melhor representa esse processo pode ser descrita por:

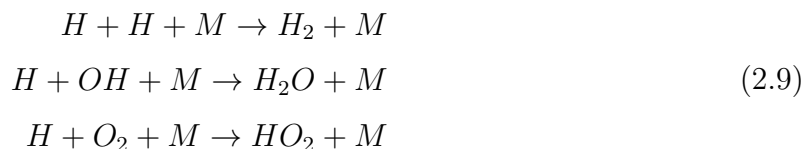


Em que R representa o radical de um hidrocarboneto. Posteriormente, o CO formado é oxidado em  $\text{CO}_2$  em uma velocidade menor de reação, sendo a principal reação

de oxidação dada por:



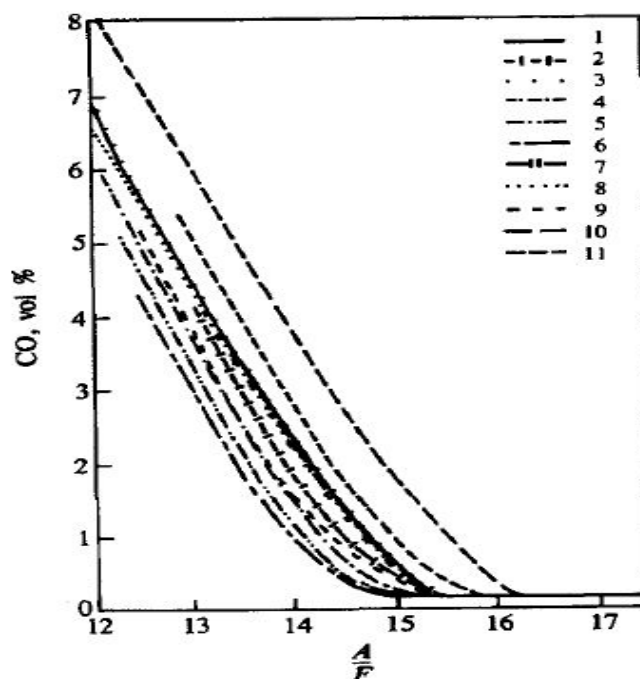
Paralelamente a esse processo, ocorrem reações de recombinação de três corpos que são importantes para a química de CO (HEYWOOD, 1988). Dessas reações destacam-se:



Em sistemas com pré-mistura de ar-combustível, a formação de CO é controlada principalmente pela cinética química, sendo esta dependente do tempo de residência da mistura na câmara de combustão. Quando a temperatura na câmara de combustão decresce, devido aos processos de expansão e exaustão dos gases, a concentração desse poluente não atinge o equilíbrio. Isso se deve principalmente as reações de terceiro corpo, pois elas não ocorrem em velocidade suficiente. Assim, os níveis de CO observados na exaustão encontram-se entre os valores de equilíbrio para temperatura e pressão na fase de compressão e combustão da mistura ar-combustível e o equilíbrio para essas condições na exaustão (TURNS, 2013; HEYWOOD, 1988).

A razão de equivalência também constitui um parâmetro importante na emissão de monóxido de carbono. Para misturas ricas, CO é um dos principais produtos da combustão e sua concentração na exaustão varia proporcionalmente com a variação da razão de equivalência. Entretanto, para misturas pobres, a concentração de monóxido de carbono não é muito sensível a mudanças nesse parâmetro (HEYWOOD, 1988). Para misturas estequiométricas ou levemente empobrecidas, a concentração de monóxido de carbono tem relação com a temperatura no processo de combustão devido a dissociação do dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) (TURNS, 2013). A Figura 14 mostra esse comportamento de CO para motores de combustão interna para diferentes razões de ar-combustível.

Figura 14 – A emissão de CO para diferentes razões ar-combustível



Fonte: (HEYWOOD, 1988)

Em chamas não pré-misturadas, a injeção de combustível e a formação da mistura ar-combustível são parâmetros importantes que influenciam na emissão de CO, pois favorecem a formação de regiões excessivamente ricas ou excessivamente pobres em combustível na câmara de combustão. Em regiões com razão de equivalência local baixas, a propagação de chama é dificultada, já para regiões com excesso de combustível, pode faltar oxigênio para combustão ou não haver tempo suficiente para que esse processo ocorra por completo (TURNES, 2013). Outras formas de se produzir CO constituem em: extinção de chama em superfícies frias e oxidação incompleta dessa espécie devido a presença de hidrocarbonetos não queimados provenientes de *crevices*, camadas de óleo lubrificante ou depósitos nas paredes da câmara de combustão (HEYWOOD, 1988; TURNES, 2013).

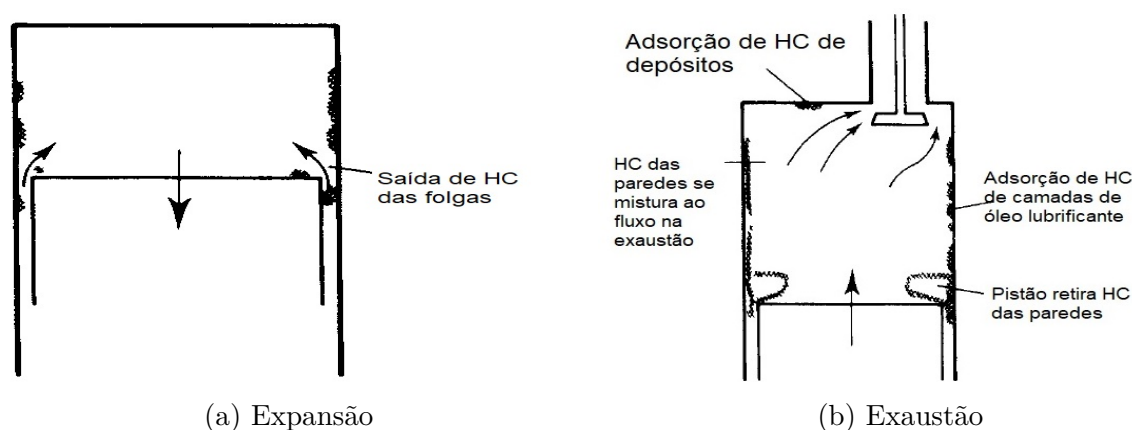
### 2.1.7.3 Hidrocarbonetos Não-Queimados

A emissão de hidrocarbonetos (HC) provém da combustão incompleta do combustível e é uma medida da ineficiência da combustão, representando perda na eficiência do motor (CHENG et al., 1993). Em motores de combustão interna, para regimes normais de operação, a emissão de HC apresenta valores entre 1000 a 3000 ppm (para C1, que representa número de carbonos). A emissão desse poluente é favorecida para misturas ricas em combustível, mas também pode ocorrer em casos de falhas na ignição para misturas empobrecidas. Vários são os mecanismos que levam a emissão de hidrocarbonetos não queimados: preenchimento das folgas na câmara de combustão com mistura não quei-

mada, extinção de chama nas paredes da câmara de combustão, absorção de combustível em camadas de óleo lubrificante, baixa qualidade da combustão e depósitos nas paredes da câmara. Esses mecanismos correspondem a processos ou caminhos pelos quais o combustível escapa da combustão durante a propagação da chama, a qual se inicia no momento da ignição e se extingue próximo as paredes da câmara de combustão (CHENG et al., 1993). No entanto, qualquer HC que escape da combustão primária pode ser oxidado durante os processos de expansão e exaustão dos gases. Todos esses processos, com exceção da ocorrência de falha da ignição da mistura ar-combustível, resultam em uma concentração de HC maior próximo as paredes do cilindro e uma distribuição não uniforme na câmara de combustão (HEYWOOD, 1988).

O mecanismo de *crevice* consiste no preenchimento de folgas na câmara de combustão com mistura ar-combustível não queimada ou parcialmente oxidada no processo de compressão dos gases no cilindro. Nessa fase, a pressão dentro da câmara de combustão aumenta e a mistura não queimada é forçada para dentro desses volumes. As principais regiões onde isso ocorre são nos volumes entre o pistão, anéis dos pistão e parede da câmara. Dependendo da geometria na entrada dessas folgas, da composição da mistura não queimada e do estado termodinâmico que ela se encontra, a chama não é capaz de oxidar essa mistura. Na expansão e exaustão dos gases, a pressão no cilindro é reduzida. Quando a pressão nos *crevices* se torna maior que a do cilindro, a mistura é novamente liberada para dentro da câmara de combustão (HEYWOOD, 1988). A Figura 15 mostra esse mecanismo nas fases de expansão e exaustão dos gases:

Figura 15 – Mecanismo de emissão de hidrocarbonetos não queimados



Fonte: Adaptado de (TURNS, 2013)

O mecanismo de *crevice* é a maior fonte de HC em motores de combustão interna. A tabela 4 apresenta estimativas da massa total de gases e de hidrocarbonetos não queimados nas regiões do pistão, anéis e paredes do cilindro para um motor à combustão interna típico.

Tabela 4 – Quantidade de gás entre em folgas do cilindro

	% massa	ppm C
Total de gases em todas as regiões de <i>crevice</i>	8,2	
Total de gases de volta à câmara de combustão	7,0	
Gases não queimado de volta à câmara de combustão	3,7-7,0	5000-9400
Gases não queimado para <i>blowby</i>	0,5-1,2	
Total de mistura não queimada escapando da combustão primária	4,2-8,2	

Fonte: (HEYWOOD, 1988)

Outro mecanismo que contribui para a emissão de hidrocarbonetos não queimados é a absorção e dessorção dessas espécies em óleo lubrificante. Durante a compressão da carga e conseqüente aumento de pressão na câmara de combustão, parte do combustível é absorvido pelo óleo lubrificante. Na combustão, a concentração das espécies combustíveis é reduzida, o que leva a dessorção do combustível de volta para a câmara. A dessorção também acontece na expansão e exaustão dos gases. As espécies introduzidas de volta na câmara de combustão em regiões com temperaturas baixas não são queimadas e são expelidas na exaustão (HEYWOOD, 1988). Conforme estudo reportado por Heywood (1988), a emissão de HC é proporcional ao consumo de óleo lubrificante.

A extinção de chama na câmara de combustão antes que todo o combustível seja consumido é uma fonte de HC sobre determinadas condições de operação dos motores. A propagação da chama pode ocorrer normal a parede, paralelamente ou angularmente. O processo de extinção de chama é analisado pela relação da liberação de calor dentro da chama e a perda de calor para as paredes da câmara (número de Peclet). Parâmetros que definem esse número são: a densidade da mistura, a velocidade laminar de chama, calor específico, temperatura e condutividade térmica. Dentre as causas que podem ocasionar esse mecanismo, tem-se a queda brusca de temperatura e pressão na expansão dos gases no cilindro o que leva a um resfriamento acentuado da mistura não queimada à frente da chama e conseqüente alta emissão de HC. Dentre as condições de operação em que a extinção de chama tem maior probabilidade de ocorrer em motores, tem-se a operação em baixa ou nenhuma carga, pois com isso a fração de gás residual é maior devido a menor velocidade do motor. Frações grandes de EGR, levam a diminuição da velocidade de propagação da chama e o surgimento de regiões muito pobres em combustível. Assim, quanto maior a fração de EGR e quanto mais brusca a variação de temperatura na expansão, menor a qualidade da combustão (HEYWOOD, 1988).

Depósitos nas paredes da câmara de combustão devido a desgaste do motor pelo uso também aumentam a emissão de HC. Segundo Heywood (1988), absorção e dessorção de hidrocarbonetos deve ser o mecanismo pelo qual ocorre aumento na emissão desse



poluente. Quando os hidrocarbonetos não queimados são levados de volta a câmara de combustão na fase de expansão dos gases, parte é misturada aos produtos da combustão e deixam o cilindro na fase de exaustão. Adicionalmente, o movimento do pistão na fase de exaustão arrasta os gases remanescentes nas paredes do cilindro, criando vórtices e os empurrando para o topo do cilindro. Com isso, esses gases deixam o cilindro no final da exaustão.

Para combustão de combustíveis não pré-misturados, a formação da mistura ar-combustível e as características do injetor de combustível também influenciam na emissão de HC. Regiões muito pobres favorecem a ocorrência de pirólise, principalmente em cargas baixas. Entretanto, para regiões ricas, ou a quantidade de ar para a combustão pode ser insuficiente ou pode não haver tempo o bastante para que as reações de oxidação ocorram por completo (TURNES, 2013).

Apesar da ação de todos esses mecanismos, hidrocarbonetos não queimados que escapam da combustão primária podem ser oxidados durante os processos de expansão e exaustão dos gases dentro do cilindro. Isso ocorre quando esses hidrocarbonetos são misturados aos gases queimados em alta temperatura, e são aquecidos até o ponto em que as reações de oxidação acontecem. Segundo Heywood (1988), os hidrocarbonetos não queimados se difundem nos gases produtos da combustão muito rapidamente. Assim, na exaustão, os hidrocarbonetos não queimados constituem em uma mistura de várias espécies de hidrocarbonetos, pirólise e produtos de oxidação parcial do combustível.

Algumas espécies, como o metano, não são reativas ou não produzem danos diretos à saúde humana e outras são muito reativas, produzindo poluição atmosférica e cancerígena. As emissões de hidrocarbonetos dependem também da composição do combustível. Combustíveis com alta concentração de compostos aromáticos e olefinas produzem maiores concentrações de hidrocarbonetos reativos. Espécies encontradas na exaustão podem não fazer parte da composição do combustível, mas se formarem a partir de pirólise e síntese do combustível. Oxigenados também participam na formação de poluição atmosférica e são compostos odorantes e irritantes para o corpo humano. As espécies oxigenadas encontradas são: carbonilas, fenóis, e não-carbonilas. Das carbonilas fazem parte os aldeídos e quetonas alifáticos, que causam problemas respiratórios. Os fenóis consistem em não-carbonilas, metanol, etanol e outros (HEYWOOD, 1988).

### 2.1.8 Dinâmica de Fluidos Computacional Aplicada a Motores de Combustão Interna

A Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD - *Computational Fluid Dynamics*) consiste em uma análise computacional de sistemas fluidodinâmicos, a qual tem sido amplamente aplicada no desenvolvimento de motores de combustão interna. A partir de

tal análise, fenômenos que ocorrem dentro do cilindro, tais como: combustão, reações químicas, escoamento, transferência de calor dentre outros, podem ser previstos complementando e ou reduzindo custos de análises experimentais. Para caracterizar esses fenômenos, são aplicados submodelos, como por exemplo, mecanismos de reações químicas, os quais descrevem os caminhos de reação entre as espécies reagentes durante a combustão (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). Nesta revisão serão descritos os modelos computacionais considerados na execução deste trabalho.

### 2.1.8.1 Equações de Conservação

A análise numérica dos importantes processos que ocorrem em um motor advém da resolução das equações de conservação de massa, transporte de espécies químicas, conservação da energia, conservação da quantidade de movimento dentre outras. Em sistemas não pré-misturados, como em motores com injeção direta de combustível, ar e combustível são misturados pelo movimento do escoamento dentro da câmara de combustão e a turbulência, o que demanda a resolução de equações para o transporte de espécies, passivos e turbulência. O escoamento também controla a temperatura na combustão e a concentração espacial das espécies químicas. As equações governantes para a combustão de combustíveis no estado gasoso são apresentados a seguir (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007):

- Equação da Continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = S \quad (2.10)$$

- Equação do Momentum - que governa a velocidade do fluido

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_i} = \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + S_i \quad (2.11)$$

Nas equações 2.10 e 2.11,  $\rho$  corresponde a massa específica da mistura,  $u$  a velocidade e  $p$  a pressão. O termo fonte é representado por  $S$ , o qual para a Equação 2.10 pode corresponder a evaporação ou a outro submodelo computacional. Para a Equação 2.11, o termo fonte pode representar forças gravitacionais, acoplamento de *spray* de combustível ou fontes de massa.  $\tau_{ij}$  é o tensor de esforços viscosos que é obtido segundo a Equação 2.12.

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \quad (2.12)$$

Nesta equação,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica e  $\delta_{ij}$  o delta de Kronecker.

- Equação de estado Redlich-Kwong

Em 1949, Otto Redlich e Joseph Neng Shun Kwong publicaram o modelo matemático conhecido como Equação de Estado Redlich-Kwong, o qual correlaciona as grandezas massa específica, pressão e temperatura em fluidos compressíveis a fim de prever as propriedades na fase gasosa das espécies. Essa correlação empírica é apresentada na Equação 2.13 (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

$$p = \frac{RT}{v - b} - \frac{\alpha \frac{p_c v_c^2}{\sqrt{T_r}}}{v_2 + \beta v_c v} \quad (2.13)$$

$v$  corresponde a volume,  $v_c$  é o volume crítico calculado por  $v_c = \frac{RT_c}{p_c}$ ,  $T_c$  é a temperatura crítica,  $p_c$  a pressão crítica,  $\alpha$  representa forças atrativas entre moléculas com valor 0.42748 N,  $\beta$  representa o volume de moléculas e tem valor 0.08664  $m^3$ .

- Equação para o transporte de espécies

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i Y_k)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad (2.14)$$

Nesta equação,  $D_k$  é o coeficiente de difusão mássica, calculado pela equação 2.15,  $\dot{\omega}_k$  corresponde ao termo fonte em que estão representadas a taxa volumétrica de geração ou destruição de espécies químicas.

$$D_t = \frac{\nu_t}{S_{c_t}} \quad (2.15)$$

em que  $S_{c_t}$  corresponde ao número de Schmidt, o qual representa uma medida da eficiência do momentum em relação ao transporte de massa (BERGMAN et al., 2011)

- Equação de conservação da Energia

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j e) = -P \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left( K_t \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D \sum h_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + S \quad (2.16)$$

Em que  $Y_k$  é a fração mássica das espécie  $k$ ,  $D$  é o coeficiente de difusão mássica,  $P$  é a pressão,  $e$  é a energia interna,  $K$  é a condutividade térmica,  $h_k$  corresponde a entalpia específica de cada espécie  $k$ . A Equação 2.16, representa a conversão da energia química liberada durante a combustão em calor. Nesta equação,  $S$  é o termo fonte representando o ganho ou a perda de energia especificada pelo usuário. O termo  $-P \frac{\partial u_j}{\partial x_j}$  representa a pressão

de trabalho nas fases de expansão e compressão da mistura. O termo  $\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$  representa a dissipação de energia cinética em calor devido a viscosidade e o termo  $\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D \sum h_m \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right)$  representa o transporte de energia devido a difusão das espécies.

A condutividade térmica para fluidos turbulentos é calculado segundo a equação:

$$K_t = K + c_p \frac{\mu_t}{Pr_t} \quad (2.17)$$

Na Equação 2.17,  $K_t$  é a condutividade da turbulência,  $\mu_t$  a viscosidade dinâmica turbulenta,  $c_p$  é o calor específico e  $Pr_t$  o número de Prandtl turbulento.

### 2.1.8.2 Modelo de Turbulência *Reynolds-Averaged Navier-Stokes*

O modelo de turbulência é responsável pelo cálculo do transporte de energia e momentum para dentro e fora de um volume de controle no modelo computacional devido ao movimento das partículas de fluidos, o qual se deve a formação e dissipação de vórtices dentro do cilindro. Nesta seção, será apresentada uma revisão bibliográfica do modelo numérico de turbulência *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS) RNG (do inglês *Renormalization Group* k- $\epsilon$ , o qual fornece informações de propriedades médias do escoamento em relação ao tempo e foi aplicado no presente estudo.

Os modelos k- $\epsilon$  são atualmente os mais usados e validados na literatura, os quais possibilitam a análise da turbulência em termos do transporte das propriedades turbulentas por convecção e difusão assim como a produção e a destruição de turbulência. Neste modelo, é assumido que a tensão de Reynolds é proporcional a ação de esforços viscosos no escoamento médio e duas equações de transporte são resolvidas: a de energia cinética da turbulência ( $k$ ) e a taxa de dissipação dessa energia ( $\epsilon$ ). O modelo RNG k- $\epsilon$  remove das equações governantes os movimentos turbulentos de pequena escala, os quais demandariam alto custo computacional, considerando seus efeitos em termos de movimentos de grandes escalas (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

Para a solução de um escoamento turbulento, é aplicada a decomposição de Reynolds nas propriedades do fluido, tal como a velocidade como mostrado na equação 2.18 (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007):

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (2.18)$$

em que  $u_i$  é a velocidade instantânea do fluido,  $\bar{u}_i$  é a velocidade média e  $u'_i$  a flutuação. Essa decomposição é então aplicada nas equações de conservação, que para massa e transporte estão representadas nas equações 2.19 e 2.20.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.19)$$

e

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\bar{\rho} u'_i u'_j) \quad (2.20)$$

em que  $\tilde{u}_i$  é a média de Frave, que corresponde a uma média ponderada de uma propriedade do fluido pela densidade e é definida para a velocidade, por exemplo, como:

$$\tilde{u}_i = \frac{\rho \tilde{u}_i}{\bar{\rho}} \quad (2.21)$$

As tensões de Reynolds são termos extras que surgem nas equações de transporte devido a interação entre várias flutuações turbulentas. Isso ocorre devido a troca de momentum pelo transporte convectivo causados pelas vorticidades, as quais aceleram as camadas de fluidos com menor velocidade e freiam as camadas com maior velocidade. Com isso, as camadas de fluido sofrem esforços de cisalhamento. Na presença de gradientes de temperaturas ou concentração de espécies, são gerados também fluxos de calor e espécies, afetando as equações de momentum e energia. As tensões de Reynolds são calculadas no modelo k- $\epsilon$ , admitindo-se que as tensões são proporcionais a uma viscosidade turbulenta efetiva. Em 1887, Boussinesq propôs que as tensões de Reynolds poderiam ser proporcionais também a taxa de deformação do fluido (Equação 2.22) (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007):

$$\tau_{ij} = 2\mu_t A_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left( \rho k + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right) \quad (2.22)$$

em que  $k$  corresponde a energia cinética da turbulência e  $\mu_t$  a viscosidade da turbulência, ambos definidos por:

$$k = \frac{1}{2} \widetilde{u'_i u'_i} \quad (2.23)$$

$$\mu_t = c_\mu \rho \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.24)$$

Na equação 2.24,  $c_\mu$  é uma constante do modelo utilizada para ajuste de um fluido particular. Na equação 2.22,  $A_{ij}$  corresponde a taxa de tensão de cisalhamento, dada por:

$$A_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.25)$$

As equações adicionais de transportes para o cálculo energia cinética da turbulência e para a dissipação dessa energia, são apresentadas nas equações 2.26 e 2.27, respectivamente.

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i k}{\partial x_i} = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\mu}{Pr_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} - \rho \epsilon + \frac{c_s}{1.5} S_s \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i \epsilon)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu}{Pr_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) + \\ + c_{\epsilon 3} \rho \epsilon \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \left( c_{\epsilon 1} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \tau_{ij} - c_{\epsilon 2} \rho \epsilon + c_s S_s \right) \frac{\epsilon}{k} + S - \rho R \end{aligned} \quad (2.27)$$

em que  $S$  é um termo fonte fornecido pelo usuário,  $S_s$  é um termo fonte representando as interações com o *spray* de combustível (fase discreta). As constantes  $c_{\epsilon 1}$ ,  $c_{\epsilon 2}$  e  $c_{\epsilon 3}$  são relacionadas as fases de compressão e exaustão. O termo  $R$  é calculado por:

$$R = \frac{C_\mu \eta^3 (1 - \eta/\eta^0) \epsilon^2}{(1 + \beta \eta^3) k} \quad (2.28)$$

em que:

$$\eta = \frac{k}{\epsilon} \sqrt{2A_{ij}A_{ij}} \quad (2.29)$$

### 2.1.8.3 Algoritmo PISO

Na solução numérica de um escoamento, o cálculo do campo de velocidade e campo de pressão surgem como resultados numéricos. Entretanto, os gradientes de pressão são fontes de momentum para o escoamento e por isso, essas duas grandezas são correlacionadas. Cada componente da velocidade a ser calculada, aparece na equação de momentum. Além disso, a pressão e o campo de velocidades devem satisfazer a equação de continuidade. A solução das equações de transporte podem ser obtidas por métodos iterativos e dentre esses métodos, o PISO ( do inglês *Pressure Implicit with Splitting of Operators* destaca-se por ser um método capaz de resolver escoamentos compressíveis e incompressíveis (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007; RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

Para a solução das equações de transporte pelo algoritmo PISO, primeiramente as equações de momentum são resolvidas com valores estimados ou intermediários do campo de pressão afim de se obter o campo de velocidade. O passo seguinte corresponde a correção dos valores de velocidade pela solução da equação de continuidade, pois se o campo de pressão não estiver correto, os valores de velocidade obtidos no primeiro passo não irão satisfazer essa equação. Para fluidos compressíveis, a equação de continuidade pode ser usada para o cálculo da densidade e a equação de energia para o cálculo da

temperatura. Com isso, a pressão pode ser obtida então pela solução da equação de estado ( $p = p(\rho, T)$ ). Uma vez que a pressão é obtida, a velocidade é atualizada e as equações de transporte são novamente resolvidas assim como o campo de pressão é atualizado. O método PISO conta com um segundo passo de correção do campo de pressão pela solução das equações de momentum e continuidade. Este processo é repetido até que o critério de convergência seja alcançado ou o limite de correções, ambos definidos pelo usuário do modelo. Entretanto, caso o limite de iterações seja atingido sem que a solução tenha convergido é reduzido o passo de tempo da simulação numérica (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007; RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

#### 2.1.8.4 Número CFL e Passo de Tempo

O número CFL (Courant-Friedrichs-Lewy), estima o número de células por quais uma quantidade determinada irá se mover durante o passo de tempo da simulação numérica. Este parâmetro é estimado para transporte convectivo, velocidade do som e transporte apresentado nas equações 2.30, 2.31, 2.32 (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

$$cfl_u = u \frac{\delta t}{\delta x} \quad (2.30)$$

$$cfl_{mach} = c \frac{\delta t}{\delta x} \quad (2.31)$$

$$cfl_\nu = \nu \frac{\delta t}{\delta x^2} \quad (2.32)$$

em que  $\delta t$  é o passo de tempo,  $\delta x$  é o comprimento da célula,  $u$  é a velocidade,  $c$  a velocidade do som e  $\nu$  a viscosidade cinemática.

No início da simulação numérica do motor, o passo de tempo é aumentado em 25% e são checadas as restrições desse parâmetro. Também é verificado se no passo de tempo anterior a solução numérica convergiu de acordo com o limite de iterações especificados (pelo algoritmo PISO). Caso isso não aconteça, o passo de tempo é reduzido. No presente estudo, o passo de tempo é variável e assim também é limitado pelo números máximos de CFL. Além disso, os submodelos computacionais, tais como os de *spray* de combustível, combustão e centelha também limitam o passo de tempo da simulação numérica (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

#### 2.1.8.5 Modelos Computacionais de Injeção de Combustível

Na análise por meio da simulação computacional do processo de combustão em MCI, a injeção de combustível compreende vários submodelos que discretizam o processo de atomização do combustível e a evaporação do mesmo. No programa utilizado

no presente estudo, é introduzido no domínio computacional conjuntos de gotas esféricas idênticas em relação sua geometria e propriedades transportadas na localização e taxa especificada pelo usuário. Esses conjuntos de gotas passam por vários processos, tais como: quebras (primária e secundária), arrasto e colisão, dispersão e interação com as paredes da câmara e evaporação. Os submodelos computacionais que modelas estes processos serão abordados nesta seção.

### Modelo Computacional de Quebra Primária de Gotas de Combustível

O modelo numérico Blob é aplicável para modelagem de *spray* de combustível de cone denso para determinar o diâmetro das gotas de combustível líquido inseridas no domínio. Para este modelo, as gotas são consideradas esféricas com diâmetro calculado em função do coeficiente de contração de área do bocal do injetor, o qual é mostrado na Equação 2.33 (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

$$C_a = C_d/C_v \quad (2.33)$$

em que  $C_d$  o coeficiente de descarga e  $C_v$  é o coeficiente de velocidade. Este, por sua vez, é calculado em função da pressão máxima de injeção de combustível, perfil de injeção de combustível e parâmetros tais como a massa de combustível injetada e duração da injeção, todos especificados pelo usuário.

Segundo Baumgarten (2006), esse método é considerado o melhor na definição de condições iniciais do processo de injeção de combustível. No entanto, ele não representa um detalhamento físico do processos relevantes e não mapeia os efeitos tridimensionais do bocal e ângulo de *spray*.

### Modelo Computacional de Atomização de Combustível KH-RT

Este modelo de atomização de combustível permite que dois modelos de quebra secundária de gotas de combustível sejam executados de forma concorrente. Uma distância de quebra ( $L_b$ ) é calculada (Equação 2.34) de forma que somente o modelo de Kelvin-Helmholtz seja utilizado para o cálculo numérico da quebra. Além dessa distância, é verificado se o modelo de Rayleigh-Taylor é capaz de quebrar a gota e se não, o modelo KH é utilizado.

$$L_b = C_{bl} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} d_0 \quad (2.34)$$

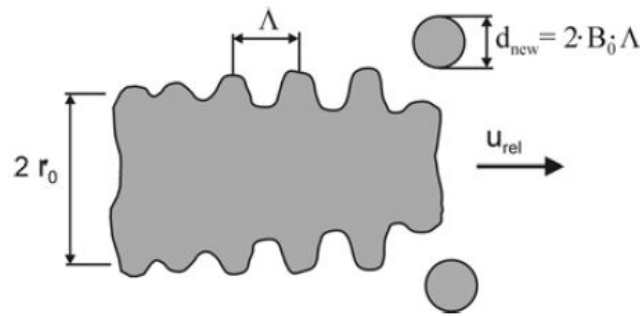
em que  $C_{bl}$  é uma constante de ajuste da intensidade de quebra,  $B_1$  é uma constante de quebra do modelo KH,  $\rho_l$  é a densidade do combustível líquido,  $\rho_g$  é a densidade do gás circundante e  $d_0$  o diâmetro inicial da gota. Quando  $C_{bl}$  é nula, ambos os modelos



atuam assim que as gotas deixam o bocal do injetor de combustível (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

O modelo de quebra de gotas de Kelvin-Helmholtz, ilustrado na Figura 16, descreve a atomização do combustível a partir de forças de cisalhamento que atuam na superfície do jato líquido devido a diferença de velocidades na interface entre o jato de combustível e o gás circundante (REITZ et al., 1987). Para a solução desse modelo, são assumidas as hipóteses de líquido e gás incompressíveis assim como o gás sendo invíscido. Tanto o movimento do jato líquido quanto o do gás são representados pelas equações linearizadas de Navier-Stokes nas formas de funções corrente e potencial. A quebra da gota ocorre quando para uma função de dispersão ( $\omega$ ) (Equação 2.35), que relaciona o crescimento de uma perturbação no fluido ao seu respectivo comprimento de onda ( $\Lambda$ ) (Equação 2.36), é atingida a taxa máxima de crescimento de oscilação ( $\Omega$ ), Equação 2.37 (BAUMGARTEN, 2006).

Figura 16 – Modelo de atomização de gotas de Kelvin-Helmholtz



Fonte:(BAUMGARTEN, 2006)

$$\omega^2 + 2\nu_1 k^2 \omega \left( \frac{I_1'(kr_0)}{I_0(kr_0)} - \frac{2kl}{k^2 + l^2} \frac{I_1(kr_0)}{I_0(kr_0)} \frac{I_1'(lr_0)}{I_1(lr_0)} \right) = \frac{\sigma k}{\rho_l r_0^2} (1 - r_0^2 k^2) \left( \frac{l^2 - k^2}{l^2 + k^2} \frac{I_1(kr_0)}{I_0(kr_0)} \right) + \frac{\rho_g}{\rho_l} \left( u_{rel} - \frac{i\omega}{k} \right)^2 k^2 \left( \frac{l^2 - k^2}{l^2 + k^2} \right) \frac{I_1(kr_0)}{I_0(kr_0)} \frac{K_0(kr_0)}{K_1(kr_0)} \quad (2.35)$$

Na equação 2.35,  $I_0$  e  $I_1$  são funções de primeira espécie modificadas de Bessel,  $K_0$  e  $K_1$  são de segunda espécie,  $k = 2\pi/\lambda$  é o número de onda,  $\sigma$  é tensão na superfície,  $l^2 = k^2 + \omega/\nu_l$  em que  $\nu_l$  é a viscosidade cinemática.

$$\frac{\Lambda}{r_0} = 9,02 \frac{(1 + 0,45Z^{0,5})(1 + 0,4T^{0,7})}{(1 + 0,865We_g^{1,67})^{0,6}} \quad (2.36)$$

$$\Omega \left[ \frac{\rho_l r_0^3}{\sigma} \right]^{0,5} = \frac{0,34 + 0,38We_g^{1,5}}{(1 + Z)(1 + 1,4T^{0,6})} \quad (2.37)$$

Na Equação 2.37,  $Z$  representa o número de Ohnesorge,  $We_g$  o número de Weber e  $T$  o número de Taylor. O tamanho da nova gota formada é obtido pela Equação 2.38, em que  $r_n$  representa o raio da nova gota e  $B_0$  é uma constante de valor fixo 0,61. Essa gota dará origem a novas gotas até que seja atingido um tamanho de equilíbrio ( $r_n$ ). No entanto, apesar de não haver mais quebras essa gota continuará a perder massa.

$$r_n = B_0 \cdot \Lambda \quad (2.38)$$

Quando usado em conjunto com o modelo de quebra primária de gotas (Blob) é necessário aplicar ao modelo uma constante de ajuste (B1). Com isso, a influência do furo do bocal do injetor é considerada no cálculo da taxa de variação do raio da gota em função do tempo (Equação 2.39). Na literatura, essa constante tem valores entre 1,73 e 60 (BAUMGARTEN, 2006). Segundo Baumgarten (2006), quanto maior B1, menor é a quebra de gotas e maior a penetração de líquido. Quando menor B1, maior é a atomização do combustível, mais rápida é a formação da mistura ar-combustível e menor a penetração de líquido. O modelo de quebra de gotas secundária proposto por Reitz é ilustrado na Figura 16.

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{r - r_n}{3,788 \cdot B_1 \cdot \frac{r}{\Lambda \cdot \Omega}} \quad (2.39)$$

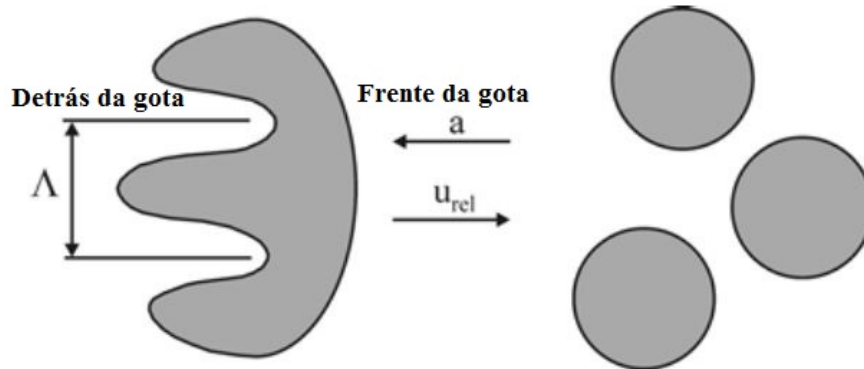
Por sua vez, o modelo de Rayleigh-Taylor descreve a formação de novas gotas de combustível baseado no estudo da instabilidade de superfícies líquidas quando aceleradas em uma direção perpendicular ao seus planos (TAYLOR, 1950). Para condições em que a aceleração ocorre de um líquido em um meio gasoso, sendo este com movimento, ondas de instabilidade podem crescer em um lado da gota pela atuação de forças de arrasto no outro lado, o que é ilustrado na Figura 17. O crescimento dessas instabilidades devido a uma forte desaceleração causada pela força de arrasto promove a quebra da gota de combustível (Equação 2.40).

$$F_{arrasto} = \pi r^2 c_d \frac{\rho_g u_{rel}^2}{2} \quad (2.40)$$

#### 2.1.8.6 Modelo Computacional de Arrasto de Gotas e Acoplamento das Fases Líquida/Gasosa

Para o cálculo da penetração do *spray* de combustível na câmara de combustão, devem ser consideradas duas fases, a líquida (fase lagrangiana) e a gasosa (fase contínua). Os parâmetros do fluido na fase gasosa (pressão, velocidade e temperatura), são calculados segundo as equações de transporte já discutidas em conjunto com o modelo de turbulência. Entretanto, na injeção de combustível líquido, as gotas são consideradas esféricas, mas sofrem variações de forma devido ao arrasto sofrido por estas. O modelo *Taylor Analogy*

Figura 17 – Modelo de atomização de gotas de Rayleigh-Taylor

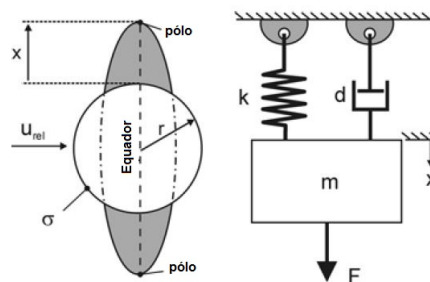


Fonte:(BAUMGARTEN, 2006)

*Break-up* (TAB) proposto por O'Rourke e Amsdem é usado para calcular os coeficientes de arrasto das gotas (BAUMGARTEN, 2006).

O modelo de TAB se baseia em uma analogia entre uma força oscilatória agindo sobre um sistema de massa-mola e uma gota de combustível oscilatória na presença de uma atmosfera gasosa, conforme mostrado na Figura 18. Nessa Figura é apresentado uma gota oscilatória penetrando em uma atmosfera gasosa com velocidade relativa  $u_{rel}$ . A equação 2.41 representa um sistema amortecido sob a ação de uma força oscilatória.

Figura 18 – Analogia do modelo TAB



Fonte: Adaptado de (BAUMGARTEN, 2006)

$$\ddot{x} = \frac{F}{m} - \frac{k}{m}x - \frac{d}{m}\dot{x} \quad (2.41)$$

em que  $F$  corresponde às forças aerodinâmicas que deformam a gota de combustível líquido fazendo com que a massa  $m$  oscile,  $x$  é o deslocamento do equador da gota de sua forma esférica.  $kx$  corresponde a força restauradora da mola, análoga a tensão superficial da gota,  $d\dot{x}$  é a força de fricção dentro da gota devido à viscosidade dinâmica do líquido.

As equações 2.42, 2.43 e 2.44 mostram o cálculo dos coeficientes do modelo TAB conforme a analogia com a equação 2.41 (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007):

$$\frac{F}{m} = C_F \frac{\rho_g |u_{rel}|^2}{\rho_l r_0} \quad (2.42)$$

$$\frac{k}{m} = C_k \frac{\sigma}{\rho_l r_0^3} \quad (2.43)$$

$$\frac{d}{m} = C_d \frac{\mu_l}{\rho_l r_0^2} \quad (2.44)$$

em que  $\rho_l$  é a densidade da fase líquida (discreta) e  $\rho_g$  a densidade do gás (fase contínua),  $r_0$  é o raio da gota sem distorção,  $\sigma$  é a tensão superficial. Transformando a equação 2.41 em adimensional, resolvendo-a analiticamente e assumindo que a velocidade relativa ( $u_{rel}$ ) é constante temos que:

$$y(t) = We_c + e^{\frac{-t}{t_d}} \left[ (y(0) - We_c) \cos(\omega t) + \frac{1}{\omega} \left( \frac{dy}{dt}(0) + \frac{y(0) - We_c}{t_d} \right) \text{sen}(\omega t) \right] \quad (2.45)$$

A equação 2.45, representa o cálculo da distorção da gota em função do número de Weber da gota ( $We_c$ ) e da frequência de oscilação ( $\omega$ ). Quando  $y$  é unitário, tem-se a máxima distorção da gota em que ela assume a forma de um disco e quando nulo a gota não se deforma mantendo sua forma esférica. O coeficiente de arrasto da gota é calculado, então, conforme a equação 2.46 (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007). Para acoplar a fase lagrangiana (*spray*) à fase euleriana (gasosa), é usada a expansão de Taylor para calcular a velocidade do gás no ponto em que se encontra um *parcel*, que corresponde a um conjunto de gotas de combustível líquido (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

$$C_D = C_{D,esfera}(1 + 2.632y) \quad (2.46)$$

#### 2.1.8.7 Modelo Computacional de Colisão de Gotas e Coalescência

A colisão das gotas de combustível é um efeito importante na região de *spray* denso próximo aos bocais do injetor de combustível, onde há uma maior concentração de gotas por volume e por isso, maior possibilidade de ocorrer colisão entre elas. A principal razão para que isso aconteça é a diferença de velocidade entre as gotas, devido a atuação da força de arrasto, quebra de gotas, turbulência, molhamento da parede e outros (BAUMGARTEN, 2006). O modelo de colisão e coalescência de gotas é usado para estimar o montante de vezes em que as gotas de combustível líquido se colidem. Para que o cálculo computacional de colisões seja possível, assume-se que para um determinado número de

gotas  $N$ , existe  $N-1$  parceiros possíveis de colisão, sendo o número de pares de colisões aproximadamente  $0,5N^2$ . O modelo para cálculo das colisões no presente estudo é chamado de *No Time Counter* (NTC) que se baseia em um modelo simples de probabilidade de colisão estocástica (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

A equação para o cálculo das colisões de acordo com o modelo NTC é apresentada a seguir (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007):

$$M_{col} = \sum_{i=1}^{\sqrt{M_{cand}}} |q_i| \sum_{j=1}^{\sqrt{M_{cand}}} \frac{q_j V_{i,j} \sigma_{i,j}}{(qV\sigma)_{max}}; \quad (2.47)$$

$$M_{cand} = \frac{N_p^2 (qV\sigma)_{max} \delta t}{2\forall}$$

em que  $q$  é número de gotas em um *parcel*,  $N_p$  o número de *parcel* na célula,  $\sigma$  representa a seção transversal de colisão ( $\sigma_{i,j} = \pi(r_i + r_j)^2$ ),  $\delta t$  é um intervalo de tempo em que é calculado a probabilidade de colisões. O valor  $(qV\sigma)$  é usado para escalonar a probabilidade de colisão e deve ser selecionado de forma que a razão  $\left(\frac{q_j V_{i,j} \sigma_{i,j}}{(qV\sigma)_{max}}\right)$  seja maior que 1.  $M_{cand}$  corresponde ao limite da soma e ao número de pares de gotas que podem sofrer colisão, sendo o custo computacional proporcional a esse limite.

A restrição para o uso desse modelo é para  $M_{cand} > N_p^2/2$ , caso em que o uso de outro modelo com cálculos diretos das colisões é mais eficiente. Para definir se a colisão vai ocorrer entre um *parcel*  $i$  e  $j$ , é necessário que a equação 2.48 seja satisfeita. Esta equação é apresentada a seguir (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

$$r < \frac{q_g V_{i,j} \sigma_{i,j}}{(qV\sigma)_{max}} \quad (2.48)$$

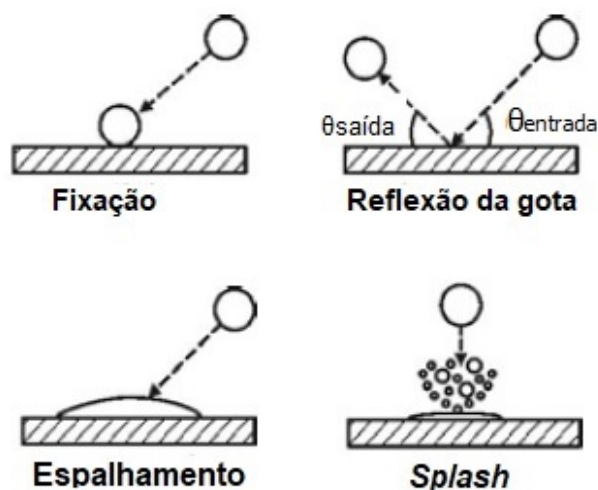
em que  $q_g$  representa o maior número de gotas entre  $q_i$  e  $q_j$ . Após a colisão ou a coalescência das gotas, é definido se essas gotas sofrem uma separação alongadora ou reflexiva pelo modelo *Post Collision Outcomes*. Isso é feito comparando-se o número de Weber de colisão ( $We_{col}$ ) com um número de *Weber\_bouncing*. Se  $2We_{col} > We_{bouncing}$  assume-se que duas gotas saltam. Se  $2We_{col} \geq We_{bouncing}$ , então pode ocorrer coalescência permanente, separação por alongamento ou reflexiva (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

#### 2.1.8.8 Modelos Computacionais para Interação das Gotas de Combustível com as Paredes

O impacto do combustível na parede da câmara de combustão é um processo importante na formação de mistura com grande influência na combustão e na formação de poluentes, tais como HC e particulados. Dois processos físicos estão envolvidos nessa fase: o desenvolvimento do *spray* na parede e a formação de filme líquido. Quando não ocorre a formação de filme líquido, a combustão acontece em ambientes muito quentes

devido ao maior aquecimento do *spray* de combustível. Além disso, a taxa de evaporação do combustível é maior, pois o *spray* se dispersa mais dentro da câmara. Na Figura 19 são apresentados os modos de interação da parede que podem ocorrer entre ela e uma gota de combustível em motores de combustão interna (BAUMGARTEN, 2006).

Figura 19 – Modelos de interação gotas-parede



Fonte: Adaptado de (BAUMGARTEN, 2006)

Na Figura 19, o regime de fixação da gota ocorre quando esta tem pouca energia cinética, se adere a parede mantendo sua forma esférica e continua seu processo de evaporação. A reflexão da gota pode ocorrer em paredes secas e com temperaturas elevadas ou em casos em que já existe um filme de combustível líquido na parede da câmara e a energia de impacto é baixa. O espalhamento da gota ocorre quando esta atinge a parede em velocidade moderada e em superfícies secas ou molhadas. Por fim, *splash* ocorre quando a gota atinge a parede da câmara com alta energia de impacto (BAUMGARTEN, 2006).

Os parâmetros que definem qual o regime de interação das gotas de combustível com as paredes da câmara de combustão são: a velocidade e o ângulo da gota incidente, a viscosidade do líquido, temperatura, tensão superficial, espessura do filme na parede, rugosidade e temperatura da parede. Esses parâmetros são relacionados no número de Weber, que significa a razão entre energia cinética da gota e a energia em sua superfície, e o número de Laplace, que corresponde a uma razão entre a tensão de superfície e as forças viscosas que atuam no líquido. Ambos estes números são apresentados nas Equações 2.49 e 2.50 (BAUMGARTEN, 2006).

$$We = \frac{\rho v_n^2 d}{\sigma} \quad (2.49)$$

$$La = \frac{\rho_l \sigma d}{\mu_l^2} \quad (2.50)$$

em que  $\rho_l$  é a densidade do líquido,  $v_n$  componente da velocidade da gota normal a superfície,  $d$  o diâmetro da gota,  $\sigma$  é a tensão superficial e  $\mu_l$  a viscosidade dinâmica do líquido.

No programa usado no presente estudo, o modelo de formação de filme de combustível líquido nas paredes da câmara de combustão utiliza uma abordagem em que parte dos cálculos assumem quantidades baseadas em partículas individuais enquanto outras quantidades são baseadas no filme. Para a modelagem do filme líquido, são resolvidas equações de momentum, apresentada na equação 2.51, com a finalidade de se obter as velocidades das partículas e a pressão no filme.

$$u_{p,i}^{n+1} = \frac{\frac{\rho_l h_\alpha}{dt} u_{p,i}^n + \tau_{w,\alpha} t_{\alpha,i} + \frac{2\mu_l}{h_\alpha} u_{parede,i} + S_{\alpha,i} - \Xi_{\alpha,i} n_{\alpha,i}}{\frac{\rho_l h_\alpha}{dt} + \frac{2\mu_l}{h_\alpha} + \dot{M}_{imp,\alpha}}; \quad (2.51)$$

$$\Xi_\alpha = \frac{\rho_l h_\alpha}{dt} (u_{p,i}^n - u_{parede,i}) n_{\alpha,i} + S_{\alpha,i} n_{\alpha,i} - \dot{M}_{imp,\alpha} u_{wall,i} n_{\alpha,i}$$

$\alpha$  é a face da parede em que a partícula está localizada,  $\rho_l$  é a densidade do líquido,  $h_\alpha$  é a espessura do filme,  $u_{p,i}^n$  é a velocidade da partícula no filme no passo de tempo anterior,  $\tau_{w,\alpha}$  é a tensão de cisalhamento provocada pelo gás circundante no filme na parede da câmara de combustão,  $t_{\alpha,i}$  é um vetor unitário na direção do movimento do gás,  $\mu_l$  é a viscosidade líquida,  $u_{parede,i}$  a velocidade do fluido na fronteira,  $n_{\alpha,i}$  é o vetor normal à fronteira e  $S_{\alpha,i}$  é um termo da equação dependente da fonte de momentum de molhamento da parede da câmara de combustão.  $\dot{M}_{imp,\alpha}$  é a massa que atinge a parede, calculada conforme Equação 2.52 (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

$$\dot{M}_{imp,\alpha} = \frac{\sum_p \rho_l V_p}{|A_{\alpha,i}| dt} \quad (2.52)$$

Nesta equação, é considerada a soma das partículas que são aderidas à face  $\alpha$  no passo tempo corrente. A reflexão da gota ocorre quando seu número de Weber é menor que um número Weber de referência especificado no programa. Para o regime de *splash*, dois modelos se destacam neste estudo: O'Rourke e Bai-Gosman. O modelo de O'Rourke possui duas opções para determinar quando ocorre *splash*: baseando-se num valor de energia crítica (com valor  $E_c^2 = 3330$  em  $J^2$ ) ou em um valor crítico de Weber. A energia da gota é calculada conforme a equação 2.53 (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007)

$$E^2 = \frac{We_i}{\min\left(\frac{h_\alpha d, 1}{+} \frac{\delta_{bl}}{d}\right)} \quad (2.53)$$

em que  $h_\alpha$  é a espessura do filme,  $d$  o diâmetro da gota incidente e  $\delta$  a espessura da camada limite. Quando o número crítico de Weber é usado, ocorre *splash* quando  $We_i > We_{splash}$ . Se ocorrer *splash*, uma fração da massa da gota é usado para criar um novo parcel que passa por *splash* e a outra parte do combustível é incorporado ao filme.

O modelo de Bai-Gosmann é mais detalhado que o modelo de O'Rourke, pois considera como critério para definir se ocorre *splash* da gota de combustível líquido incidente parâmetros, tais como: temperatura da parede, números de Weber das gotas incidentes e condições da parede (seca ou molhada) (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007). Em casos de paredes secas, os regimes de aderência e espalhamento das gotas são combinados em um único regime, já no caso de paredes molhadas, o regime de aderência é negligenciado (BAUMGARTEN, 2006). Os critérios para se determinar o que ocorre com a gota incidente em superfícies secas são (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007):

- Para número de Weber e temperatura de parede baixos, é formado filme líquido na parede pela coalescência das gotas em paredes secas e pode ocorrer reflexão das gotas para a parede molhada;
- para número de Weber baixo e alta temperatura de parede, ocorre reflexão do *parcel* sem que ocorra quebra das gotas. O ângulo de reflexão da gota é igual ao ângulo incidente;
- para número de Weber alto e temperatura de parede baixa, o *parcel* é quebrado em gotas menores;
- para ambos número de Weber e temperatura de parede altos, ocorre *splash* e escorregamento sobre a parede. Neste regime, cada *parcel* incidente é quebrando em dois outros *parcels*.

Outros processos que podem ocorrer com o filme líquido consistem em sua separação das paredes da câmara de combustão devido a *quinas* e *film stripping*, que são fragmentos de líquido retirados do filme líquido devido a ação de ondas na superfícies causadas por forças aerodinâmicas atuando sobre o filme. O critério para definir se este processo ocorre é dado por:

$$c_{sep} \frac{\rho_l [(u_{p,i} - u_{par,i})t_i]^2 \text{sen}\theta}{1 + \text{cos}\theta} > p_{gas} \quad (2.54)$$

em que  $c_{sep}$  é uma constante,  $p_{gas}$  é a pressão local do gás circundante. Para a ocorrência de *film stripping*, os fragmentos de líquidos são quebrados quando as ondas atingem uma amplitude crítica e formam gotas cujos diâmetros são dependentes da constante do modelo e da taxa máxima de crescimento das ondas (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).



## 2.1.8.9 Modelo Computacional de Evaporação do Combustível

A correlação de Frossling foi utilizada no presente estudo para o cálculo da variação do raio das gotas de combustível líquido no tempo na fase de evaporação, Equação 2.55 (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

$$\frac{dr_0}{dt} = -\frac{\rho_g D}{2\rho_l r_0} \frac{Y_1^* - Y_1}{1 - Y_1^*} Sh_d \quad (2.55)$$

em que  $D$  é a difusividade mássica,  $\rho_g$  a densidade do gás,  $r_0$  o raio inicial da gota,  $Y_1^*$  é a fração mássica de vapor na superfície e  $Y_1$  é a fração mássica de vapor e  $Sh_d$  é o número de Sherwood dado por:

$$Sh_d = (2.0 + 0.6Re_d^{1/2} Sc^{1/3}) \frac{\ln(1 + \frac{Y_1^* - Y_1}{1 - Y_1^*})}{\frac{Y_1^* - Y_1}{1 - Y_1^*}} \quad (2.56)$$

em que:

$$Y_1^* = \frac{M_{C_nH_{2m}}}{M_{C_nH_{2m}} + M_{mist}(\frac{p_{gas}}{p_v} - 1)} \quad (2.57)$$

onde  $M_{mist}$  é o peso molecular da mistura,  $p_{gas}$  é a pressão do gás,  $p_v$  a pressão de vapor da gota em sua temperatura atual. Tem-se ainda:

$$Re_d = \frac{\rho_{gas} |u_i + u_i - v'_i| d}{\mu_{ar}} \quad (2.58)$$

Na equação 2.58,  $d$  é o diâmetro da gota e  $\mu_{ar}$  é a viscosidade do ar na temperatura  $\hat{T} = \frac{T_{gas} + 2T_d}{3}$ , em que  $T_{gas}$  é a temperatura do gás,  $T_d$  a temperatura da gota,  $Sc$  é o número de Schmidt ( $Sc = \mu_{ar}/(\rho_g D)$ ). O produto  $\rho_g D$  é calculado segundo a relação:

$$\rho_g D = 1.293 D_0 (\hat{T}/273)^{n_0 - 1} \quad (2.59)$$

$D_0$  e  $n_0$  são constantes determinadas experimentalmente.

Para o cálculo da temperatura na gota, ela é considerada uniforme na gota de combustível líquido e o cálculo se dá por duas equações diferenciais ordinárias. O balanço de energia é apresentado na Equação 2.61, que representa o aquecimento da gota ou o fornecimento de energia para o processo de vaporização (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

$$\bar{A}_d Q_d = c_l m_d \frac{dT_d}{dt} - \frac{dm_d}{dt} H_{vap} \quad (2.60)$$

Nesta equação,  $c_l$  é o calor específico do líquido,  $T_d$  a temperatura da gota,  $m_d$  a massa da gota e  $H_{vap}$  o calor latente de vaporização na temperatura da gota. A taxa de condução de calor na gota é calculada segundo a equação 2.61 (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

$$Q_d = \frac{Nu_d k_{ar} (T_{gas} - T_d)}{\bar{d}_0} \quad (2.61)$$

em que  $Nu_d$  é calculado por:

$$Nu_d = (2.0 + 0.6 Re_d^{1/2} Pr_d^{1/3}) \frac{\ln(1 + \frac{Y_1^* - Y_1}{1 - Y_1^*})}{\frac{Y_1^* - Y_1}{1 - Y_1^*}} \quad (2.62)$$

$k_{ar}$  é a condutividade térmica do ar na temperatura  $\hat{T}$ ,  $T_{gas}$  a temperatura do gás e  $Pr_d$  o número de Prandtl.  $\bar{A}_d$  e  $\bar{d}_0$  são a área média da gota e o diâmetro, respectivamente,  $m_d^*$  é um valor intermediário da massa da gota. As Equações 2.63, 2.64 e 2.65 mostram como essas grandezas são calculadas.

$$\bar{A}_d = \frac{\pi(r_0^{*2} + r_0^2)}{2} \quad (2.63)$$

$$\bar{d}_0 = \frac{2r_0^{*2} + 2r_0^2}{2} \quad (2.64)$$

$$m_d^* = \frac{\rho_l 4\pi r_0^3}{3} \quad (2.65)$$

$r_0^*$  é um valor intermediário para o raio, calculado quando a temperatura na gota  $T_d$  é atualizada e usado para determinar a quantidade de vapor a ser adicionado na célula computacional (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

#### 2.1.8.10 Modelo Computacional de Combustão

O *solver* SAGE é responsável por solucionar as equações do modelo de cinética química detalhada resolvendo sistemas de equações diferenciais ordinárias para o cálculo das taxas de reações para cada reação elementar de um mecanismo cinético químico. Este consiste em um conjunto de reações elementares que descrevem os caminhos de reação na oxidação de um combustível. Entretanto, a atuação do SAGE é ativada quando a temperatura mínima e uma fração molar específica de HC são ultrapassados. Além disso, no modelo computacional da combustão é aplicado o modelo de multi-zona, em que grupos de células com propriedades termodinâmicas similares são agrupadas e distribuídas de forma aleatória entre processadores (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

Para a solução das reações químicas na combustão, um mecanismo de reação química com múltiplos passos pode ser escrito da seguinte forma (TURNES, 2013):

$$\sum_{m=1}^M v'_{m,r} \chi_m \Leftrightarrow \sum_{m=1}^M v''_{m,r} \chi_m; \quad (2.66)$$

$$r = 1, 2, \dots, R$$

Nesta equação,  $v'_{m,r}$  e  $v''_{m,r}$  são os coeficientes estequiométricos para os reagentes e produtos, respectivamente,  $m$  é espécie e  $r$  a reação.  $R$  é o número total de reações,  $\chi_m$  é o símbolo químico para a espécie  $m$  e  $M$  o número total de espécies. A taxa de produção de espécies é dada por:

$$\omega_m = \sum_{r=1}^R v_{m,r} q_r \quad (2.67)$$

$$m = 1, 2, \dots, M$$

e

$$v_{m,r} = v''_{m,r} - v'_{m,r} \quad (2.68)$$

O progresso da reações é calculado segundo a equação:

$$q_r = k_d \prod_{m=1}^M [X_m]^{v'_{m,r}} - k_r \prod_{m=1}^M [X_m]^{v''_{m,r}} \quad (2.69)$$

Nesta equação,  $[X_m]$  é a concentração molar das espécies  $m$ ,  $k_d$  e  $k_r$  são os coeficientes de reação direta e reversa, respectivamente.  $k_d$  é obtido por uma equação de Arrhenius (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007).

$$k_d = A_r T^{b_r} e^{(-E_r/R_u T)} \quad (2.70)$$

em que  $A_r$  é o fator pré-exponencial,  $b_r$  é um expoente da temperatura  $T$ ,  $E_r$  é a energia de ativação e  $R_u$  a constante universal dos gases.  $k_r$  pode ser obtido de forma análoga a equação 2.70 ou pela relação  $k_r = k_{fr}/K_{cr}$  em que  $K_{cr}$  é determinado de propriedades termodinâmicas conforme a equação 2.71

$$K_{cr} = \exp\left(\frac{\Delta S_r^0}{R} - \frac{\Delta H_r^0}{R}\right) \left(\frac{P_{atm}}{RT}\right)^{\sum_{m=1}^M v_{mr}}$$

$$\frac{\Delta S_r^0}{R} = \sum_{m=1}^M v_{mr} \frac{S_m^0}{R} \quad (2.71)$$

$$\frac{\Delta H_r^0}{RT} = \sum_{m=1}^M v_{mr} \frac{H_m^0}{RT}$$

em que  $S$  é entropia e  $H$  entalpia. A solução dessas equações servem de base para a solução das equações governantes para a conservação da massa e energia.

#### 2.1.8.11 Mecanismos Cinéticos Químicos

Em modelos de combustão com cinética química detalhada, são utilizados mecanismos cinéticos químicos que descrevem as reações elementares que ocorrem na combustão da mistura ar-combustível e os processos pelos quais são formados os produtos dessas reações. Portanto, eles exercem um papel importante no entendimento da formação e destruição de espécies poluentes (TURNES, 2013; TAN et al., 2016). Estes mecanismos podem descrever detalhadamente as etapas envolvidas nesse processo como também podem apresentar somente algumas etapas (TURNES, 2013). Sendo a gasolina uma mistura complexa de hidrocarbonetos: lineares, em cadeias, alifáticos e aromáticos, não é possível obter um mecanismo cinético químico que descreva todas as reações químicas em sua combustão detalhadamente, devido também ao fato de que ainda não são compreendidas todas as reações cinéticas que ocorrem nesse processo. Além disso, mecanismos cinéticos químicos detalhados demandam alto custo computacional, o que torna impossível utilizá-los em aplicações que requerem muitas simulações em curtos intervalos de tempo. Assim, os mecanismos cinéticos químicos desenvolvidos atualmente representam a combustão com uma quantidade menor de espécies químicas e reações simplificadas (TAN et al., 2016).

No desenvolvimento de mecanismos cinético químicos de reação são escolhidas para cada classe de hidrocarboneto presente na gasolina espécies individuais capazes de representar o comportamento cinético de espécies semelhantes. Pela seleção e proporção de espécies representativas do parâmetro a ser analisado, é possível desenvolver mecanismos com diferentes enfoques de análise, tais como: emissões, fenômeno de detonação, duração da queima dentre outros. Em geral, a concentração de poluentes na exaustão do motor não atinge valores correspondentes ao equilíbrio químico. A formação das espécies CO, HC e PM, estão relacionadas à fase primária do processo de combustão. Entretanto, óxidos de nitrogênio e enxofre são formados devido às condições de pressão e temperatura na câmara de combustão (HEYWOOD, 1988).

A formulação mais comum de mecanismos cinéticos químicos para a gasolina é baseado na mistura de iso-octano e n-heptano, pertencentes ao grupo das parafinas, conhecida como Combustível de Referência Primária (com sigla em inglês PRF - *Primary Reference Fuel*). As parafinas são responsáveis pela octanagem da gasolina (ON) e a proporção de iso-octano nessa mistura determina a tendência a ocorrência do fenômeno de detonação. Entretanto, um mecanismo que leva em conta somente essas duas espécies não é capaz de prever satisfatoriamente as curvas de pressão no cilindro e outros parâmetros de operação de um motor. Afim de superar as limitações dos PRF's, foram desenvolvidos mecanismos que incluem o Tolueno, *Toluene Reference Fuel* (TRF), que é o componente

aromático da gasolina mais abundante (acima de 35%). Essa espécie é fundamental para prever a formação de particulados (TAN et al., 2016).

Atualmente, encontram-se na literatura mecanismos cinéticos químicos que abrangem mais espécies representativas da gasolina, tais como: naftenos, olefinas e oxigenados. A adição de mais espécies tem como objetivo o desenvolvimento de mecanismos que melhor representem as misturas de gasolina para uma ampla faixa de condições de operação. Espécies da classe naftenos, por exemplo, podem ser usadas com o objetivo de avaliar fenômenos na combustão, dentre eles: extinção de chama e auto ignição da gasolina. A inclusão de espécies oxigenadas se tornou fundamental para a análise de misturas de gasolina e etanol, muito usado no Brasil (TAN et al., 2016).

Geralmente, os mecanismos cinéticos químicos são validados quando comparados com dados experimentais provenientes de ensaios em tubos de choque, máquina de compressão rápida, reator de pressão variável, e motores de ignição por compressão de carga homogênea. Os parâmetros usados para validação são: atraso de ignição, velocidade de chama laminar e perfil de concentração de espécies. Entretanto, para motores de combustão interna com injeção direta de combustível são encontrados poucos estudos na literatura em que os mecanismos cinéticos químicos foram validados nas condições de operação desse sistema. Para esses motores, reações que acontecem a temperaturas baixas tem grande importância devido ao resfriamento da câmara de combustão no momento da injeção de combustível em que o spray é vaporizado. Devido também a emissão de particulados para esses motores em condição de carga estratificada ser maior quando comparados a motores PFI e as partículas tipicamente serem de menor tamanho, (<10nm), os mecanismos cinéticos químicos tem que ser capazes de prever esses comportamentos (TAN et al., 2016; TURNS, 2013).

#### 2.1.8.12 Modelos de Emissões de Poluentes

##### Mecanismo Estendido de Zeldovich

O mecanismo estendido de Zeldovich representa a formação de NO para temperaturas acima de 1800 K (TURNS, 2013). As principais reações químicas de formação dessa espécie são apresentadas na equação 2.72 (HEYWOOD, 1988):



A energia de ativação para a equação 2.72 de 319050 kJ/kmol (TURNES, 2013), e os coeficientes das taxas de reações 2.72 a 2.74 são (TURNES, 2013):

$$\begin{aligned}
 k_{N,1d} &= 7.6e13 \exp[-38000/T(K)] & [m^3/kmol.s] \\
 k_{N,1r} &= 1.6e13 & [m^3/kmol.s] \\
 k_{N,2d} &= 6.4e9T \exp[-3150/T(K)] & [m^3/kmol.s] \\
 k_{N,2r} &= 1.5e9T \exp[-19500/T(K)] & [m^3/kmol.s] \\
 k_{N,3d} &= 4,1e13 & [m^3/kmol.s] \\
 k_{N,3r} &= 2,0e14 \exp[-23650/T(K)] & [m^3/kmol.s]
 \end{aligned} \tag{2.75}$$

A formação de NO por esse mecanismo tem uma forte dependência da temperatura e pode ocorrer tanto nos gases a frente da chama como nos gases pós-chama. Entretanto, a formação deste poluente é quase sempre predominante nos gases pós-chama devido as altas pressões e temperaturas desses gases e ao curto tempo de residência dos gases na zona de reação da chama (HEYWOOD, 1988).

Quando essas emissões são calculadas por modelos cinéticos de equilíbrio químico, considera-se que a química de reação dessa espécie é mais lenta que as reações químicas referentes à queima do combustível (TURNES, 2013). Com isso, pode-se considerar que a combustão da mistura ar-combustível e a formação de NO são processos independentes e as concentrações das espécies O, O<sub>2</sub>, OH, H e N<sub>2</sub> podem ser aproximadas das concentrações em equilíbrio nas condições de pressões e temperaturas locais. A taxa de formação de NO é então apresentada na equação 2.76 (HEYWOOD, 1988).

$$\frac{\partial [NO]}{\partial t} = \frac{2R_1 \left\{ 1 - \left( \frac{[NO]}{[NO]_e} \right)^2 \right\}}{1 + \left( \frac{[NO]}{[NO]_e} \right) \frac{R_1}{(R_2 + R_3)}} \tag{2.76}$$

Em que [] significa concentração em mols por centímetro cúbico e o subscrito *e* indica condição de equilíbrio químico. *R*<sub>1</sub>, *R*<sub>2</sub> e *R*<sub>3</sub> são calculados segundo as equações:

$$\begin{aligned}
 R_1 &= k_1^+ [O]_e [N_2]_e = k_1^- [NO]_e [N]_e \\
 R_2 &= k_2^+ [N]_e [O_2]_e = k_2^- [NO]_e [O]_e \\
 R_3 &= k_3^+ [N]_e [OH]_e = k_3^- [NO]_e [H]_e
 \end{aligned} \tag{2.77}$$

Em que *k*<sub>1</sub><sup>+</sup> e *k*<sub>1</sub><sup>-</sup> são constantes de reação direta e reversa, respectivamente. Valores típicos de *R*<sub>1</sub>, *R*<sub>2</sub> e *R*<sub>3</sub> são apresentados na tabela 5 (HEYWOOD, 1988):

Tabela 5 – Valores Típicos de R1, R1/R2 e R1/(R2+R3)

Razão de equivalência	R1	R1/R2	R1/(R2+R3)
0,8	5,8e-5	1,2	0,33
1,0	2,8e-5	2,5	0,26
1,2	7,6e-5	9,1	0,14

Fonte: (HEYWOOD, 1988)

O valor máximo da taxa de concentração inicial de NO é encontrado quando a mistura é estequiométrica e reduz de forma acentuada para misturas pobres ou ricas. O tempo característico do processo de formação de NO é apresentado na equação 2.78 (HEYWOOD, 1988):

$$\tau_{NO} = \frac{8e - 16T \exp(58300/T)}{p^{-0,5}} \quad [s] \quad (2.78)$$

A hipótese de equilíbrio químico não é válida quando as espécies O e OH são formadas em quantidades acima do equilíbrio, o que pode ocorrer dentro da região de chama e em processos pós-chama que ocorrem em intervalos de tempo de escala muito pequena, pois para concentrações muito acima da condição de equilíbrio de O as taxas de formação de NO aumentam consideravelmente. Com isso, a formação de NO é acoplada a cinética de oxidação do combustível e descrita pelas reações do mecanismo térmico (TURNS, 2013). Para formação de NO pelo mecanismo térmico de Zeldovich e misturas homogêneas, o processo de formação de NO pode ser correlacionado com a temperatura e pressão nas etapas de combustão e expansão dentro do cilindro durante os processos de combustão e expansão dos gases. Na combustão, a concentração de NO se eleva a partir da concentração inicial nos gases residuais e cresce afim de atingir o equilíbrio químico de acordo com a temperatura e pressão no cilindro. Porém, na fase de expansão, em que ocorre o resfriamento dos gases, essa concentração final de NO ultrapassa os valores de equilíbrio e tem-se então a decomposição dessa espécie. Dependendo das condições de operação do motor, a concentração de NO pode ou não chegar próximo ao equilíbrio químico e a sua decomposição na fase de expansão também pode variar (HEYWOOD, 1988). Na exaustão, a concentração de NO estagna a níveis acima do equilíbrio químico e a fração mássica média desse poluente nessa fase pode ser calculada conforme a equação 2.79.

$$\{\bar{NO}\} = \int_0^1 \{NO\}_f dx_b \quad (2.79)$$

Em que  $\{\bar{NO}\}_f$  corresponde a fração mássica de NO final em um elemento de

carga queimada quando a fração de massa queimada era  $x_b$ . A concentração média de NO na exaustão em fração molar é dada pela equação 2.80:

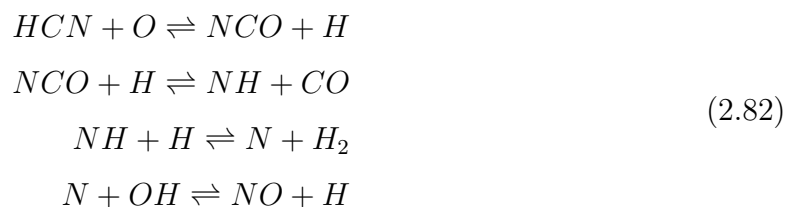
$$\tilde{x}_{NO_{médio}} = \{N\bar{O}\} \frac{M_{ex}}{M_{NO}} \quad (2.80)$$

### Mecanismo de Fenimore

O mecanismo de Fenimore, também conhecido por mecanismo imediato, descreve a formação NO na zona de chama da combustão de hidrocarbonetos antes de haver tempo disponível para sua formação pelo mecanismo térmico. Esse mecanismo consiste na reação de radicais de hidrocarbonetos com nitrogênio molecular ( $N_2$ ) formando aminas ou compostos com o grupo ciano que são então convertidos em compostos intermediários e, posteriormente, formam NO (TURNES, 2013). Esse mecanismo é mais sensível à composição química do combustível, pois depende da concentração de radicais de hidrocarbonetos, importantes para a formação da espécie HCN. Portanto, a formação de NO pelo mecanismo de Fenimore é proporcional a razão de equivalência até que a concentração de oxigênio passa a ser insuficiente. Com isso, Fenimore é importante principalmente para a combustão de misturas ricas em combustível, entretanto, para razões de equivalência maiores que 1,2 a cinética química torna-se muito complexa. A equação 2.81 apresenta as reações principais (TURNES, 2013):



A reação 2.81 é a rota principal e a sequência limitante da formação de NO. Para razões de equivalência menores que 1,2, a conversão de cianeto de hidrogênio (HCN) em NO se dá pelas seguintes reações (TURNES, 2013):



Em comparação com o mecanismo térmico, a contribuição do mecanismo imediato na formação de óxido nítrico em MCI é menor, mas importante para estimativas coerentes do total de emissões NO<sub>x</sub> (MASUM et al., 2013).



## 2.2 Estado da Arte

Nesta seção estão resumidos os principais trabalhos que foram consultados para elaboração deste estudo. Trabalhos experimentais e numéricos foram selecionados com ênfase nas emissões de poluentes para diferentes misturas de etanol e gasolina e aplicação de métodos numéricos para sua predição. Poucos estudos na literatura abordam a aplicação de mecanismos cinéticos químicos em análises fluidodinâmicas computacionais em MCI's com ignição por centelha. Assim, são listados trabalhos em que esses mecanismos são testados em motores de carga homogênea e ignição por compressão (HCCI), motores de ignição por compressão e métodos numéricos zero-dimensional, quasi-3D e tridimensional.

Kong e Reitz (2002) utilizaram um mecanismo cinético químico detalhado de 79 espécies e 398 reações para prever a combustão e as emissões das espécies CO e HC em um motor de carga homogênea e ignição por compressão (HCCI) movido a gasolina. O motor foi equipado para operar com injeção direta deste combustível com injetor do tipo *pressure-swirl* e o programa utilizado para simulação foi o KIVA 3V. Os resultados numéricos apontaram as tendências de emissão destes poluentes variando-se o instante do início da injeção do combustível e a carga. Dentre os casos analisados destacam-se dois em que mantido o mesmo instante e tempo de injeção de combustível, compararam-se os resultados experimentais e numéricos para duas rotações 700 rpm e 1737 rpm. Nesse trabalho, foi aplicado o modelo de cinética química em que a solução das espécies químicas e do escoamento são acopladas com base no equilíbrio químico e a gasolina utilizada nesta simulação era composta somente de iso-octano. Como resultados, para ambas as rotações obteve-se boa correlação dos dados numéricos para as curvas de pressão e taxa de calor liberado. Entretanto, em ambos os modelos a emissão de CO foi subestimada (com razão *predição/medição* igual a 0,4 para 700 rpm e 0,2 para 1737 rpm. De acordo com os autores, a predição de CO pode ser difícil de ser realizada, por tratar-se de um produto intermediário da combustão. Além disso, a estimativa das temperaturas de parede pode ter contribuído para esses resultados. Variando-se o instante de injeção, os resultados numéricos apresentaram boa concordância para a emissão de HC quantitativamente e qualitativamente e subestimaram as concentrações de CO. Em comparação com o presente estudo, o *solver* de cinética química utilizado, SAGE, em conjunto com o mecanismo cinético químico detalhado provê a possibilidade de se trabalhar com combustíveis multicomponentes e química detalhada da formação de CO permitindo predições mais realistas das espécies e avaliar também outras como NO<sub>x</sub> e CO<sub>2</sub>.

Dai et al. (2003) utilizaram o método numérico de simulação quasi-3D para analisar parâmetros de desempenho de um motor de combustão interna movido a misturas de gasolina e etanol E22 e E85. O modelo foi validado com base em dados experimentais e reporta maior eficiência térmica e BMEP para o E85 como combustível. Em relação às emissões, os autores observaram uma redução de emissões de HC e CO na exaustão para

toda a faixa de razão de equivalência ar-combustível analisada. Atrasando-se o avanço de ignição, foi observado nesse estudo que as emissões de  $\text{NO}_x$  eram reduzidas.

Costa e Sodré (2010) compararam o desempenho e emissões de um motor 1.0 L multicomcombustível, com oito válvulas e quatro tempos movidos a etanol hidratado (contendo 6,8% de teor de água) e mistura de gasolina e etanol (com 78% de gasolina e 22% de etanol) testando o motor em bancada dinamométrica. Foram investigados parâmetros de desempenho, tais como: torque, pressão média efetiva, consumo específico de combustível e eficiência térmica. Com relação as emissões, foram analisadas medições de CO,  $\text{CO}_2$ , HC e  $\text{NO}_x$  sem a presença de catalisadores na exaustão. Os resultados mostraram que o etanol hidratado atingiu maior eficiência térmica, de até 14,1% maior que o outro combustível, e maior (54%) consumo de combustível do que a mistura de gasolina e etanol em toda a faixa de velocidade do motor estudada. Para rotações abaixo de 3250 rpm, não houve diferenças muito expressivas para torque entre os dois combustíveis (máximo de 2,4%). Por outro lado, para altas velocidades do motor, o etanol hidratado apresentou maior torque (máximo de 3,7%). No que diz respeito às emissões de gases de escape, o etanol hidratado reduziu o CO e o HC, mas aumentou os níveis de  $\text{CO}_2$  e  $\text{NO}_x$  para toda a faixa de velocidades analisadas.

Turner et al. (2011) investigaram em um estudo experimental a combustão de misturas de gasolina e etanol em um motor de combustão interna com injeção direta de combustível. Neste estudo, os resultados mostraram que emissões de  $\text{NO}_x$  se mantiveram similares ou foram reduzidas a medida que a fração volumétrica de etanol na mistura era elevada. As emissões de HC e CO apresentaram um comportamento semelhante. Estes resultados foram atribuídos a aumento da eficiência de combustão, maiores velocidades de chama, melhor formação de mistura ar-combustível e menores temperaturas dentro câmara de combustão.

Hindi (2011) realizou simulações numéricas para analisar a formação da mistura ar-combustível e o processo de combustão em um motor de combustão interna. Dois combustíveis foram analisados sendo estes etanol e isoctano. Neste trabalho, em relação a emissão de poluentes, utilizando o etanol observou-se um resfriamento da temperatura dentro do cilindro e menor formação de  $\text{NO}_x$ , CO e fuligem em relação ao isoctano. Entretanto, a emissão de hidrocarbonetos não queimados para o etanol foi maior em relação a combustão com isoctano. Em relação a formação de mistura, Hindi (2011) obteve uma mistura ar-combustível mais homogênea para o etanol causada pela sua maior difusividade mássica e com isso, uma menor duração da combustão para este combustível.

Em misturas de gasolina e etanol para injeção direta de combustível, Masum et al. (2013) citaram estudos em que a emissão de  $\text{NO}_x$  é reduzida para misturas com concentração desse combustível entre 10 e 85% em comparação com gasolina, especialmente para misturas com concentração em volume de etanol acima de 80%. Isso se deve prin-

principalmente a redução de temperatura dentro da câmara de combustão devido ao calor latente de vaporização do etanol. Outro fator importante é a maior presença de moléculas triatômicas nos produtos da combustão de etanol, que para sua formação, elevam a capacidade térmica da carga e diminuem a temperatura de combustão. Entretanto, estudos foram reportados em que a emissão de  $\text{NO}_x$  aumentou para misturas com teores menores que 20% devido ao aumento da eficiência de combustão e consequente aumento das pressões dentro do cilindro. Em estudos onde a carga foi variada, o efeito do etanol na redução de emissões de  $\text{NO}_x$  foi mais acentuado para baixas cargas, enquanto, para altas não houve redução significativa nos resultados de emissões de  $\text{NO}_x$ . Masum et al. (2013) também reportam estudos que verificam a influência da velocidade de rotação na emissão de  $\text{NO}_x$  para misturas de etanol e gasolina. Esses estudos indicam que a velocidade de chama maior do etanol pode levar a um aumento da emissão de  $\text{NO}_x$  em altas velocidades de rotação, altas cargas e misturas ricas em combustível. Entretanto, para altas rotações combustíveis com grande concentração de etanol, como o E85, pode levar a redução da emissão desse poluente devido a combinação do menor aquecimento dentro do cilindro e menor tempo disponível para o processo de combustão acontecer.

Maghbouli et al. (2013), utilizaram o código KIVA-4 para análise CFD de um modelo multidimensional de um motor diesel turbo funcionando em carga total e parcial em diferentes condições de velocidade. O objetivo deste trabalho foi criar uma metodologia para prever numericamente a combustão e a formação de poluentes em motores Diesel aplicando um mecanismo cinético químico reduzido. Nos modelos computacionais, foram feitas simulações computacionais com cinética química detalhada para um combustível multicomponente, sendo este composto por n-heptano e tolueno. Além disso, foi implementado um modelo de evaporação e um modelo de combustão para esse combustível. Considerando os modelos computacionais validados, os autores avaliaram a formação espacial dos poluentes comparando-se com a temperatura na câmara de combustão e com dados experimentais. Na comparação dos dados de emissão com os experimentais, foram obtidos resultados satisfatórios de emissões. Demesoukas et al. (2015) realizaram simulações computacionais zero-dimensionais para analisar reações pós-chama e a formação de CO e HC. A cinética de formação de CO foi feita com base em duas reações químicas elementares e em modelo de equilíbrio químico. Além disso, um modelo termodinâmico de duas zonas foi aplicado para calcular as concentrações de equilíbrio. Para modelar a formação de HC, um modelo de taxa de reação global foi aplicado juntamente com uma equação de relaxação para modelar o processo difusivo. As concentrações de CO foram subestimadas na exaustão para ambos os modelos utilizados. Para a emissão de HC não houve correlação direta dos dados numéricos com as medições desta espécie da exaustão, porém a tendência dos resultados experimentais foi observada no modelo numérico. Os autores concluíram que os modelos computacionais utilizados foram capazes de reproduzir a tendência de emissões desses poluentes, mas para obter melhores previsões de CO o

modelo de equilíbrio químico precisa ser aperfeiçoado. Para a formação de HC, obteve-se resultados satisfatórios.

Tan et al. (2016) apresentaram estudos da formação de particulados em MCI's com injeção direta de gasolina por CFD e aplicação de mecanismos cinéticos químicos reduzidos. Para este poluente, estudos com mecanismos TRF vem sendo aplicados por representar compostos aromáticos com a espécie tolueno, importantes na formação de fuligem. Entretanto, os mecanismos cinéticos químicos encontrados na literatura são em sua maioria validados para combustão em motores HCCI, os quais desviam das condições encontradas em MCI's com a tecnologia DI para gasolina. Os autores concluem que para que os modelos computacionais representem a combustão em MCI's com eficácia é necessário obter uma representação satisfatória dos combustíveis e da cinética química nas condições de operações típicas desses motores assim como modelos de formação de fuligem específicos para os tipos de misturas ar-combustível possíveis em motores com injeção direta de combustível.

Tibaquirá et al. (2018) fizeram um estudo experimental e numérico em motores movidos a misturas de gasolina e etanol para avaliar as emissões de  $\text{CO}_2$ , CO,  $\text{NO}_x$ , HC e compostos orgânicos voláteis. O modelo computacional neste trabalho é zero-dimensional, estacionário e com base em um análise de equilíbrio térmico. Como resultados, este modelo apresentou como resultados menores emissões de  $\text{NO}_x$  e maiores emissões para  $\text{CO}_2$  e HC. Em comparação com os resultados experimentais, o modelo computacional superestimou as reduções nas emissões. Em modelos numéricos zero-dimensionais não são levados em consideração a influência de parâmetros importantes como a turbulência na formação de mistura, o que pode ter causado essas diferenças entre os resultados numéricos e experimentais.

### 2.2.1 Considerações Finais

A partir da revisão da literatura, nota-se que a aplicação de mecanismos cinéticos químicos reduzidos para modelagem da combustão de combustíveis multicomponentes representa um desafio na predição de emissões por MCI's. A compreensão dos mecanismos de formação de poluentes, da formação de mistura ar-combustível e dos fenômenos físicos que ocorrem durante a combustão são fundamentais para que se possa obter resultados numéricos que se correlacionam com os experimentais. Assim, pretende-se neste estudo avaliar a predição de emissões pelo mecanismo desenvolvido no trabalho de (COTA, 2018), verificando quais condições de misturas de gasolina e etanol foram melhor representadas pelo mecanismo, a formação de mistura e comparar as tendências de emissões com a literatura. Por fim, a Tabela 6 apresenta um resumo das principais contribuições recentes feitas ao tema pelos autores citados neste capítulo.

Tabela 6 – Principais trabalhos consultados

Autores e ano	Contribuições
<a href="#">Kong e Reitz (2002)</a>	Mecanismo de cinética química detalhada aplicada a motores HCCI
<a href="#">Dai et al. (2003)</a>	Modelo numérico quasi-3D para analisar parâmetros de desempenho de um motor de combustão interna movido a misturas de gasolina e etanol E22 e E85
<a href="#">Costa e Sodré (2010)</a>	Avaliação de emissões poluentes e desempenho de motores multicompostíveis em experimentos realizados com combustível E22 e E100.
<a href="#">Turner et al. (2011)</a>	Estudo experimental da combustão de misturas de gasolina e etanol em MCI e a influência dessas misturas nas emissões de poluentes
<a href="#">Hindi (2011)</a>	Estudo numérico da formação de mistura e combustão em MCI's aplicando mecanismos cinéticos químicos para isoctano e etanol
<a href="#">Masum et al. (2013)</a>	Ampla revisão de estudos sobre as emissões de NO <sub>x</sub>
<a href="#">Maghbouli et al. (2013)</a>	Simulações numéricas de combustão em um motor de ignição por compressão, aplicando mecanismo cinético químico reduzido e avaliando as emissões de poluentes.
<a href="#">Demesoukas et al. (2015)</a>	Simulações numéricas de combustão em um MCI com modelo zero-dimensional para analisar reações pós-chama e a formação de CO e HC.
<a href="#">Tan et al. (2016)</a>	Ampla revisão de CFD aplicado a MCI's com DI de gasolina e predição de particulados
<a href="#">Tibaquirá et al. (2018)</a>	Estudo experimental e numérico em motores movidos a misturas de gasolina e etanol para avaliar as emissões poluentes

## 3 METODOLOGIA

Neste capítulo, a metodologia utilizada no trabalho é detalhada. Primeiramente é feita uma contextualização deste trabalho a partir de uma descrição do projeto ao qual ele está inserido. Logo após, são definidos o domínio computacional, os submodelos computacionais para a modelagem dos diferentes processos que ocorrem no cilindro na combustão e as condições de contorno aplicadas aos modelos. Por fim, é descrito como foi feita a avaliação das emissões de poluentes.

### 3.1 O Projeto

O presente trabalho é parte do projeto de desenvolvimento de mecanismos cinéticos químicos reduzidos para análise numérica da combustão em MCI's. Este projeto faz parte do programa de Residência Tecnológica para Engenheiros FCA em parceria com o Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFMG como parte do programa INOVAR AUTO. O objetivo é desenvolver mecanismos cinéticos químicos reduzidos capazes de reproduzir a combustão em motores possibilitando a aplicação desses mecanismos para a predição de emissão de poluentes, predição do fenômeno de detonação e representar diferentes misturas de etanol e gasolina.

Esse projeto é dividido então em quatro estudos que foram realizados conjuntamente. O primeiro estudo consiste no desenvolvimento dos mecanismos cinéticos químicos reduzidos, que são apresentados no trabalho de [Cota \(2018\)](#), no qual foram desenvolvidos 4 mecanismos, sendo um mecanismo cinético químico detalhado e 3 mecanismos reduzidos descritos na Tabela 7. O desempenho dos mecanismos foi avaliado realizando-se simulações numéricas zero-dimensionais para atraso de ignição e simulações uni-dimensionais para análise da velocidade laminar de chama. Os resultados foram comparados com medições experimentais e com mecanismos encontrados na literatura.

Tabela 7 – Mecanismos cinéticos químicos

Mecanismo	Número de espécies	Número de reações
A	1410	6107
B	239	1296
C	115	639
D	75	343

Fonte: ([COTA, 2018](#))

Concomitantemente ao desenvolvimento dos mecanismos, atividades em comum

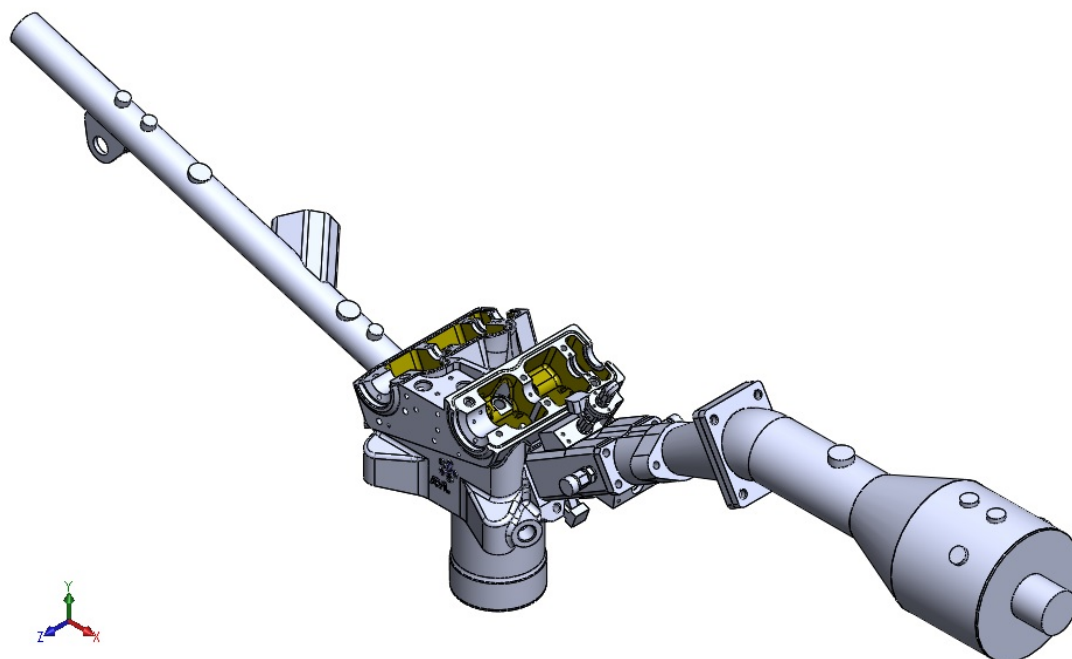
foram realizadas por Vaz (2018), Braga (2018) e o presente estudo. Contudo, enfoques diferentes foram dados nas análises e apresentações dos resultados. Vaz (2018), avaliou o desempenho dos mecanismos cinéticos químicos de reações em simulações tridimensionais da combustão em um motor monocilíndrico de pesquisa, com base em dados fornecidos pela equipe experimental do CTM-UFMG. Nesse estudo, parâmetros globais do processo de combustão, tais como curva de pressão no cilindro, taxa de liberação de calor e ângulos de queima foram avaliados para as misturas (E10, E22, E50, E85 e E100). No trabalho de Braga (2018), os mecanismos C e D foram aplicados em simulações numéricas tridimensionais do motor monocilíndrico de pesquisa para detecção da ocorrência do fenômeno da detonação para as misturas E10 e E22. O desempenho desses mecanismos foi comparado ao desempenho de um mecanismo cinético químico reduzido publicado por Abianeh, Oehlschlaeger e Sung (2015). Os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais retirados do banco de dados do CTM-UFMG.

A partir do trabalho de Vaz (2018), selecionou-se o mecanismo D para ser testado visando a predição de emissões de poluentes específicos. No presente estudo, este mecanismo cinético químico reduzido foi avaliado no que diz respeito a predição de emissão de poluentes para os combustíveis E22, E50, E85 e E100 em que as espécies analisadas correspondem a  $CO_2$ , CO, HC e  $NO_x$ . O objetivo foi verificar se as tendências de emissões ao aumentar a fração de etanol no combustível corresponde a mesmas tendências observadas nos dados experimentais e tendências encontradas na literatura.

## 3.2 Motor Monocilíndrico de Pesquisa

Nos modelos computacionais, dados de entrada e condições de contorno foram retirados de ensaios realizados pela equipe experimental do CTM-UFMG no motor monocilindro de pesquisa AVL, modelo 5496 (SCRE) para os combustíveis E22, E50, E85 e E100. Estes ensaios estão explicados no Anexo A. A Figura 20 mostra o modelo geométrico 3D fornecido pelo fabricante.

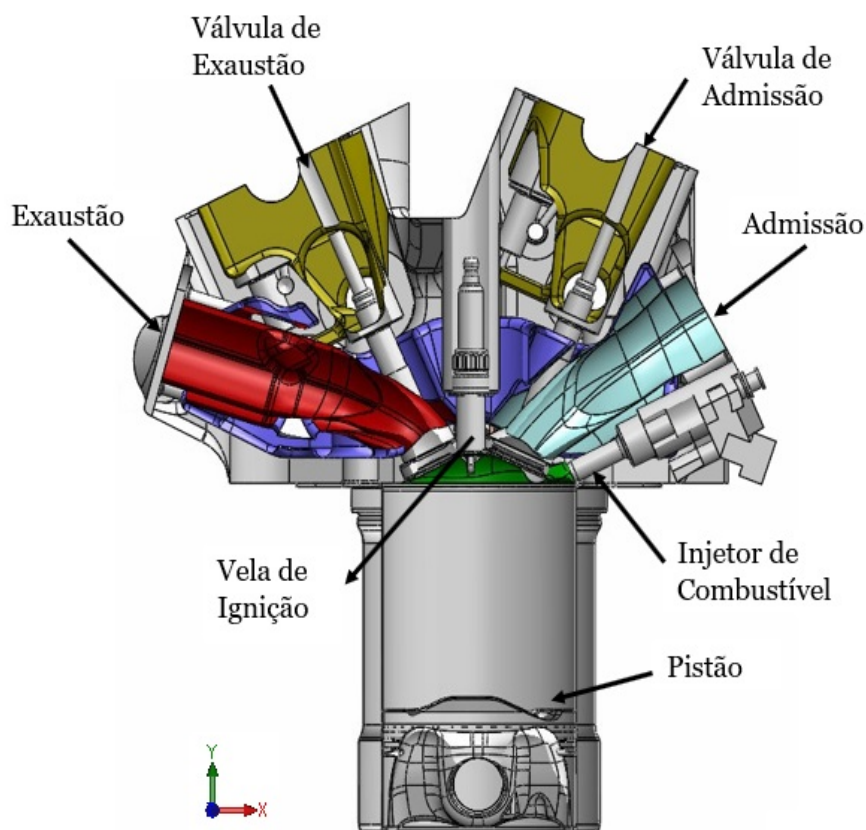
Figura 20 – Motor AVL



A Figura 21 mostra um corte no plano XY para mostrar o interior da câmara de combustão. Nessa Figura é possível ver o perfil do pistão e estão os componentes do motor, tais como: válvulas, injetor de combustível e vela de ignição.



Figura 21 – Detalhes internos do Motor AVL



A tecnologia de injeção de combustível empregada é do tipo DI utilizando o injetor multifuros modelo BOSCH HDEV 5.1, o qual possui sete furos com diâmetros de 0,17 mm cada e ângulo de cone externo de  $20^\circ$  para cada jato, sendo estes do tipo cone cheio. O motor é equipado com duas válvulas de admissão e duas de exaustão e tem suas dimensões apresentadas na Tabela 8.

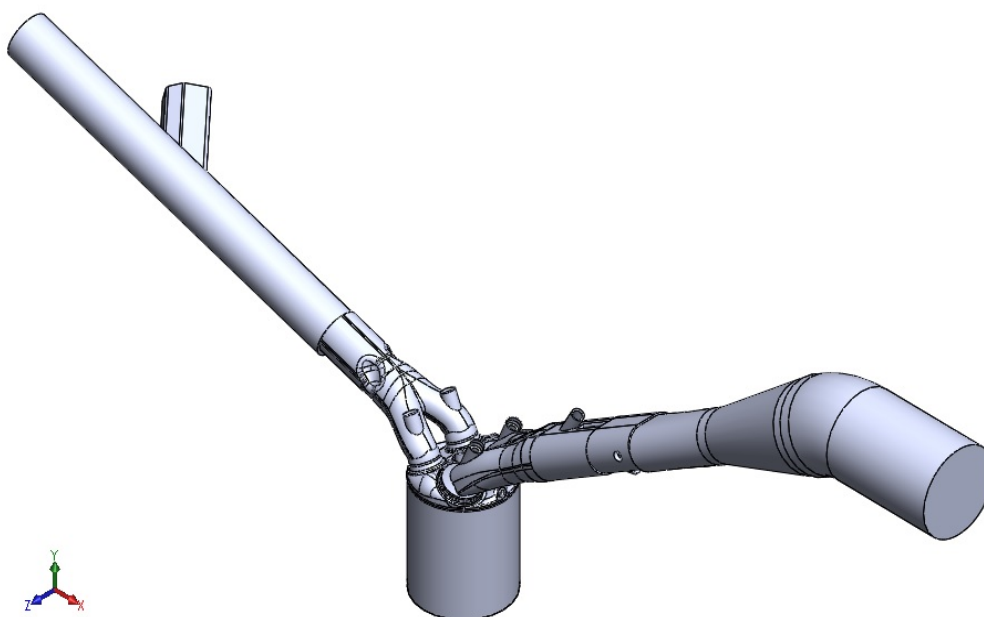
Tabela 8 – Dados do motor mono-cilindro AVL

Parâmetros	Dimensões
Diâmetro do Pistão	81,35 mm
Curso do Pistão	86,00 mm
Diâmetro do cilindro	82,00 mm
Diâmetro da guarnição do cabeçote	83,00 mm
Altura da guarnição do cabeçote	1,50 mm
Volume deslocado	454,16 cm <sup>3</sup>
Comprimento da biela	144,00 mm
Razão volumétrica de compressão	11,50:1
Máximo levantamento das válvulas de admissão	10,49 mm
Máximo levantamento das válvulas de exaustão	9,51 mm

### 3.3 Domínio Computacional

O domínio computacional é construído a partir da extração do volume interno do motor SCRE dos modelos CAD (do inglês *Computer Assisted Design*) fornecidos pela equipe do laboratório CTM-UFMG. Ambos compreendem as seguintes regiões: câmara de combustão, cilindro e dutos de admissão e exaustão. Além disso, os domínios foram delimitados considerando os posicionamentos dos sensores de pressão usados na etapa experimental nos dutos. O volume de controle com razão volumétrica de compressão 11,5:1 é apresentado na Figura 22.

Figura 22 – Domínio computacional



### 3.4 Modelo Computacional

No presente trabalho, o método de volumes finitos foi aplicado aos modelos computacionais utilizando o programa CONVERGE como ferramenta para a modelagem e simulação computacional do motor monocilíndrico de pesquisa. Este programa inclui técnicas numéricas para fazer a malha de volumes finitos e modelos físicos para descrever os processos relevantes na combustão em MCI's. Os resultados numéricos são obtidos pela resolução das equações governantes apresentadas no capítulo 2.1.8. Para a modelagem da turbulência, considerou-se o o modelo RNG  $k-\epsilon$ . O modelo de O'Rourke e Amsdem também foi aplicado nas simulações para calcular a transferência de calor para as paredes.

O algoritmo de acoplamento da pressão-velocidade PISO foi aplicado para a solução iterativa das equações de transporte afim de se obter os campos de velocidade e pressão. Para evitar que essas grandezas sejam desacopladas nessas equações, foi usado o esquema de interpolação de Rhie-Chow e a equação de estado utilizada é a de Redlich-

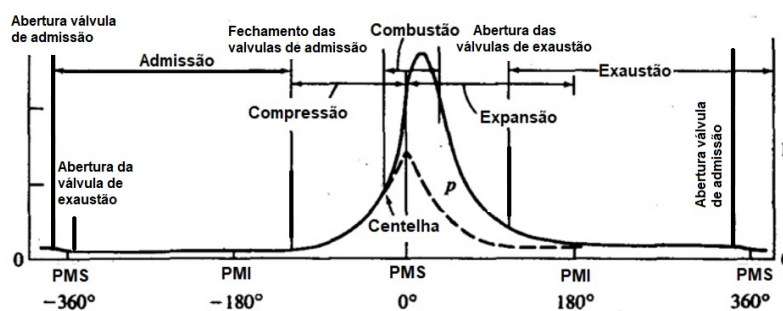
Kwong para gases não ideais. Foram especificados os parâmetros de transporte globais, sendo estes o Número de Prandtl Turbulento e Número de Schmidt Turbulento com base em valores recomendados pelo programa de 0,9 e 0,78, respectivamente. Para a solução das equações governantes no modelo, foram adotadas as tolerâncias de convergências também recomendadas pelo programa para casos transientes e fluidos compressíveis, cujos dados são apresentados na Tabela 9.

Tabela 9 – Tolerância para convergência das equações

Equações	Tolerância de convergência
Momentum	1e-5
Pressão	1e-8
Densidade	1e-4
Energia	1e-4
Espécies	1e-4
Energia cinética turbulenta ( $k$ )	1e-3
Taxa de dissipação da turbulência ( $\epsilon$ )	1e-3

As simulações numérica neste trabalho compreenderam ciclos de  $-360^\circ$  a  $360^\circ$  referentes ao movimento do eixo virabrequim, em que todos os eventos no motor são descritos dentro deste intervalo. Na Figura 23, está mostrada a referência adotada no presente estudo para se relacionar as posições angulares do eixo virabrequim com eventos no motor como abertura de válvulas, avanço de ignição e outros.

Figura 23 – Referência para eventos no motor



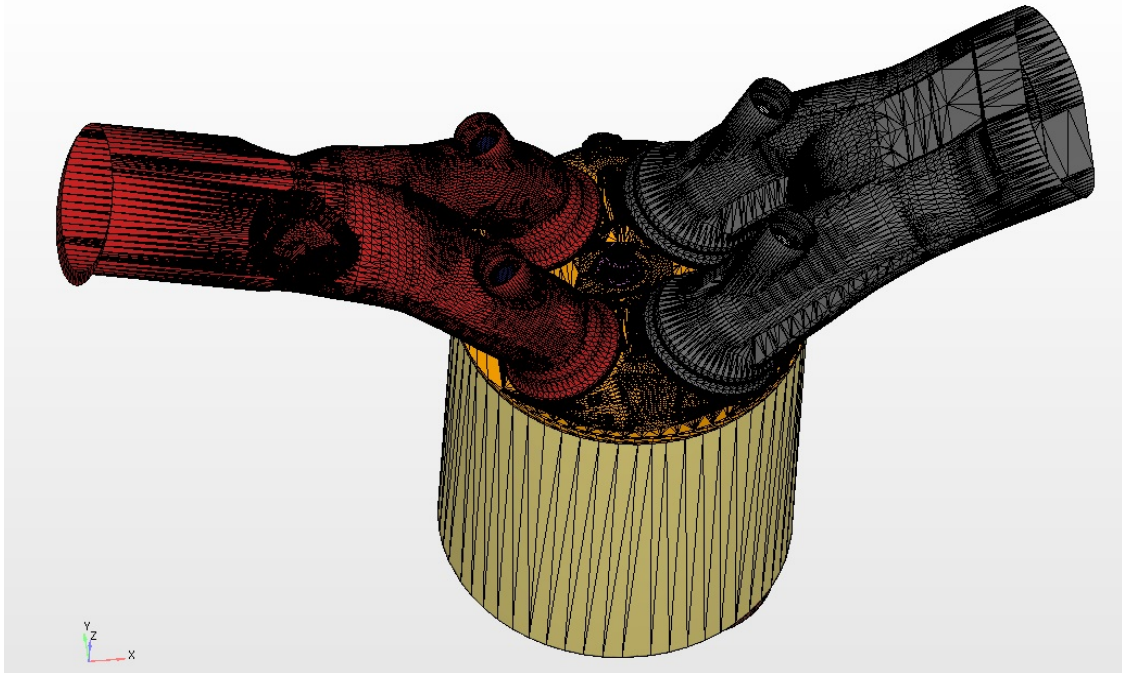
Adaptado de: (HEYWOOD, 1988)

### 3.5 Geração da Malha de Volumes Finitos

A malha de volumes finitos para a simulação numérica consiste em: uma malha superficial de volumes triangulares e uma malha de volumes finitos hexaédrica gerada durante a simulação numérica. Uma superfície fechada subdividida em elementos triangulares foi gerada no programa SolidWorks e posteriormente importada para o CONVERGE, onde a geração da malha envolve posicionamento das partes móveis do domínio, divisão

em células respeitando as fronteiras do domínio e em aplicação de refinamentos durante a simulação. No CONVERGE, a superfície é dividida em subdomínios computacionais correspondentes as várias partes do motor. Na Figura 24, estão mostrados os pórticos de admissão (cinza) e exaustão (vermelho), o cilindro (amarelo) e cabeçote (laranja).

Figura 24 – Malha superficial - Pistão em PMI



Ao longo da simulação numérica, o refinamento da malha é feito utilizando os métodos: refinamento de malha adaptativo (com sigla AMR de *Adaptive Mesh Refinement*) e refinamento fixo, sendo as dimensões iniciais dos volumes de 4 mm (dx) x 4 mm (dy) x 4 mm (dz). O AMR tem a função de refinar a malha automaticamente devido condições de flutuação e movimento tais como temperatura e velocidade. O refinamento fixo é utilizado em regiões específicas em que a solução numérica depende de uma boa resolução de malha. Este método é aplicado em regiões como *spray* de combustível e válvulas. Para quantificar o refinamento da malha utiliza-se a seguinte Equação:

$$escala_{malha} = \frac{dx_{base}}{2^n} \quad (3.1)$$

em que  $dx_{base}$  é o comprimento do volume no eixo  $x$  e  $n$  é a escala de refinamento da malha, que é especificado pelo usuário do programa.

O refinamento fixo da malha foi utilizado nas regiões: cilindro, centelha, válvulas e injetor de combustível. Nas válvulas e no cilindro aplicou-se refinamento de malha permanente. Na centelha, foram aplicados dois refinamentos cíclicos que abrangem o pe-

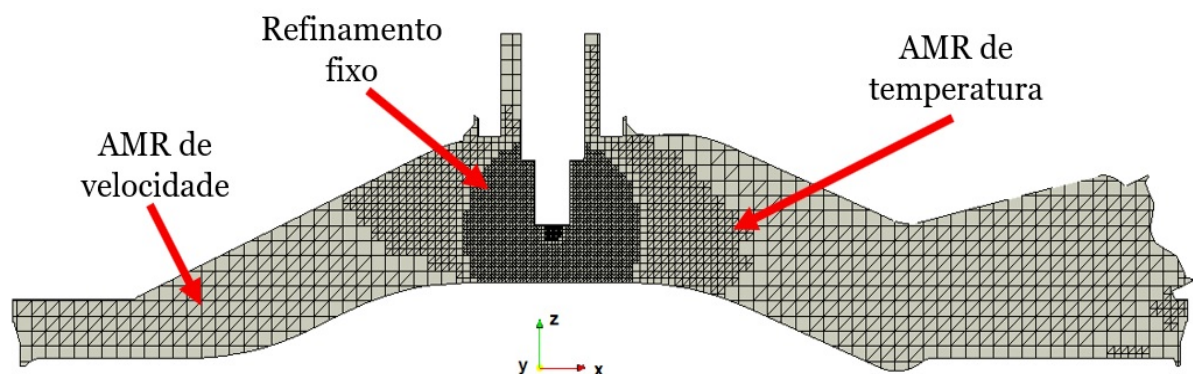
ríodo de centelha. No injetor de combustível, são aplicados também refinamentos cíclicos abrangendo o período de injeção de combustível. Os dados do refinamento fixo são resumidos na Tabela 10. Esse tipo de refinamento é aplicado em regiões críticas para a solução numérica, tais como escoamentos próximos as válvulas e *spray* de combustível.

Tabela 10 – Refinamento Fixo

Região	Modo	Escala	Nível	Tamanho da célula [mm]
Cilindro	Permanente	2		1,000
Válvulas de Exaustão	Permanente	3	2	0,500
Válvulas de Admissão	Permanente	3	2	0,500
Centelha	Cíclico	4		0,250
Centelha	Cíclico	5		0,125
Injetor de combustível	Cíclico	3		0,500
Injetor de combustível	Cíclico	3		0,500

O AMR foi aplicado nas regiões da admissão e do cilindro. Na admissão, a resolução da malha é aumentada com nível máximo de refinamento igual a três e com critério de *sub-grid* de 1 m/s. O campo de *sub-grid* foi definido como a diferença entre o campo atual e o campo resolvido, seja de uma grandeza vetorial como a velocidade ou escalar como a temperatura. Uma célula é refinada quando o valor absoluto do campo de *sub-grid* é acima do valor especificado pelo usuário do programa e volta a suas dimensões iniciais quando esse valor absoluto é abaixo de 1/5 do valor especificado. Para o cilindro, considerou-se o AMR com 3 níveis de refinamento e critério de *sub-grid* para velocidade de 1 m/s, o qual tem por finalidade caracterizar adequadamente o escoamento, que tem papel fundamental na formação de mistura. Além disso, é aplicado o critério de *sub-grid* para a temperatura de 2,5 K, o qual atua ciclicamente por um período que antecede a centelha até a abertura da válvula de exaustão (  $-25^\circ$  até  $136^\circ$  no ciclo de  $-360^\circ$  a  $360^\circ$ ) para todos os casos. Neste caso, o AMR é importante para descrever com boa resolução a frente de chama, que influencia os resultados de liberação de calor e pressão no cilindro. Esses refinamentos são exemplificados na Figura 25.

Figura 25 – Malha no domínio



### 3.5.1 Teste de Malha

No teste de malha, considerou-se um mecanismo cinético químico com 66 espécies e 215 reações publicado no trabalho de [Abianeh, Oehlschlaeger e Sung \(2015\)](#) e a mistura E10. Casos com rotação de 3000 rpm e 6 bar de BMEP foram simulados variando-se os níveis de refinamento do AMR para temperatura. Neste teste, foi avaliado a independência dos resultados do refinamento de malha na frente de chama, que foi escolhida por apresentar grandes gradientes de temperatura. Considerando o tamanho base das células de 4 mm, variou-se o nível de refinamento resultando nos tamanhos calculados pela Equação 3.1 e resumidos na Tabela 11.

Tabela 11 – Tamanhos das células testados no teste de malha

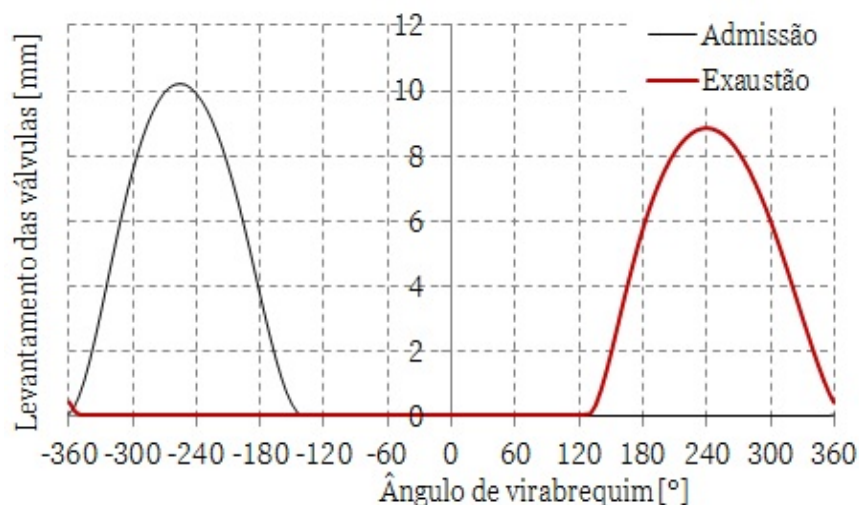
Nível de refinamento da malha	Tamanho das células [mm]
2	1,00
3	0,50
4	0,25
5	0,125

O intervalo avaliado nas simulações numéricas foi de  $-40^\circ$  a  $140^\circ$ , período que compreende momentos antes e após a combustão. Para a análise dos resultados, um plano foi definido por uma seção transversal no eixo de simetria da vela de ignição no ângulo de virabrequim  $-10^\circ$  APMS. A temperatura na frente de chama foi avaliada em todos os casos, em função da posição em uma linha traçada nesse plano e que intercepta a frente de chama. A malha final utilizada nos modelos computacionais, foi escolhida avaliando-se tempo computacional e capacidade do *hardware* de executar as simulações.

## 3.6 Condições de Contorno

Nos modelos computacionais, foram aplicados como condições de contorno: curva de pressão total no coletor de admissão e a de pressão estática na exaustão e as temperaturas dos subdomínios. Além de dados fornecidos pela equipe experimental do CTM-UFGM, foram utilizados dados de pressão na exaustão e curva de levantamento de válvulas obtidos de modelos computacionais unidimensionais, que foram desenvolvidos no trabalho de [Vaz \(2018\)](#) e que identificou um adiantamento de  $4^\circ$  da válvula de exaustão em relação ao medido experimentalmente. O diagrama utilizado nos modelos computacionais tridimensionais é apresentado na Figura 26.

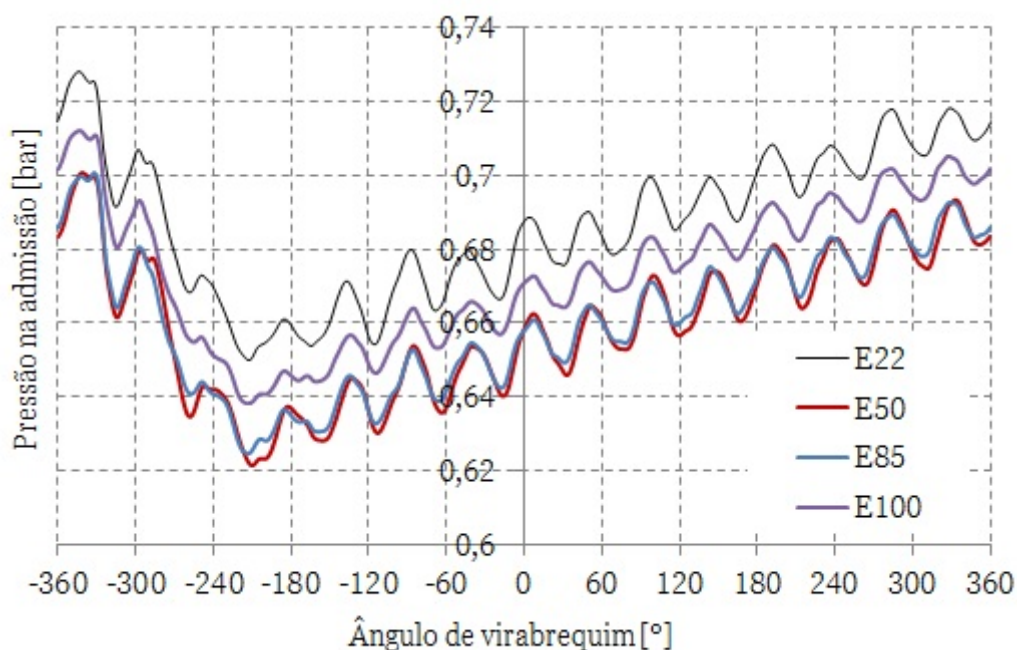
Figura 26 – Curva de levantamento das válvulas



Fonte: (VAZ, 2018)

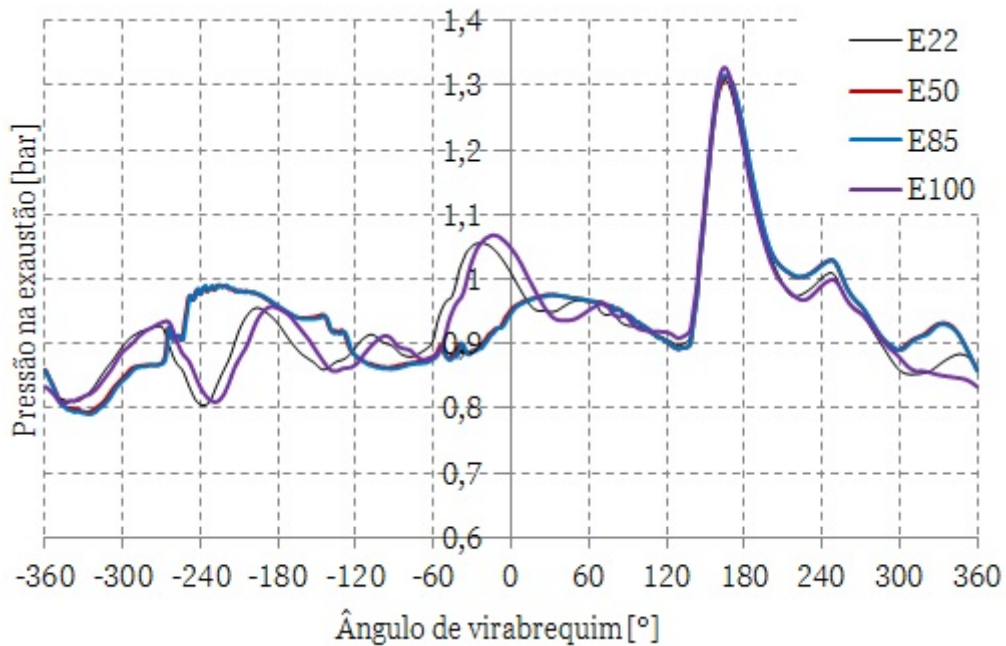
A mesma velocidade de rotação do motor de 3000 rpm foi utilizada em todos os casos analisados neste trabalho. Além disso, as curvas de pressão de admissão e exaustão em função do ângulo de virabrequim são apresentadas nas Figuras 27 e 28, respectivamente. A Tabela 12 apresenta as temperaturas retiradas dos dados experimentais para os dutos de admissão e exaustão dos gases.

Figura 27 – Pressão total na admissão



Fonte:(VAZ, 2018)

Figura 28 – Pressão estática na exaustão



Fonte: (VAZ, 2018)

Tabela 12 – Temperaturas nas entradas e saídas dos domínios

Temperaturas	E22	E50	E85	E100
Entrada na Admissão [K]	301,7	300,0	299,8	302,0
Saída na Exaustão [K]	972,7	936,0	948,4	937,0

Fonte: CTM-UFMG.

Com exceção das temperaturas nas fronteiras de entrada e saída do domínio computacional, as demais temperaturas foram estimadas com base em avaliações feitas em motores semelhantes e em condições de carga próximos. Isso foi feito, devido a dificuldade de se obter essas temperaturas experimentalmente e foram mantidas as mesmas para todos os casos simulados. A Tabela 13 apresenta essas temperaturas e os sub-domínios computacionais



Tabela 13 – Temperaturas dos sub-domínios computacionais

Sub-domínio	Temperatura [K]
Pistão	450,0
Cilindro	450,0
Cabeçote	450,0
Centelha	550,0
Eletrodo da centelha	550,0
Pórticos de Admissão	425,0
Pórticos de Exaustão	500,0
Válvulas de Admissão	480,0
Válvulas de Exaustão	525,0

### 3.7 Condições Iniciais

As simulações se iniciaram em  $136^\circ$  de virabrequim, que corresponde ao momento de abertura das válvulas de exaustão, em um ciclo anterior. Nessa condição, foram especificadas estimativas de espécies no cilindro e na exaustão com base em simulações computacionais realizadas ao longo do período em que este trabalho foi realizado, as quais são especificadas na Tabela 15. Isto foi feito visando uma menor quantidade de ciclos para se obter resultados estáveis, uma vez que nos primeiros ciclos de simulação do motor, a composição da massa residual no cilindro apresenta oscilações deixando a mistura mais pobre ou rica em espécies reativas e com isso, causando oscilações nos resultados de pressão no cilindro. Iniciando-se as simulações computacionais com dados próximos as condições estáveis de formação de mistura tem-se economia em termos de custo computacional. Dados experimentais de pressão no cilindro, na exaustão e na admissão assim como as temperaturas destes subdomínios correspondentes a esse ângulo de virabrequim foram inseridos no modelo e foram resumidos na Tabela 14. As temperaturas no cilindro e na exaustão foram consideradas iguais para evitar instabilidades causadas por gradientes de temperatura entre essas regiões.

Tabela 14 – Condições iniciais de pressão e temperatura

Caso	E22	E50	E85	E100
Pressão na admissão [bar]	0,694	0,667	0,668	0,675
Pressão na exaustão [bar]	0,904	0,934	0,895	0,905
Pressão no cilindro [bar]	3,049	3,258	3,016	3,037
Temperatura na admissão [K]	301,7	300,0	299,8	302,0
Temperatura na exaustão [K]	1159,7	1621,3	1615,2	1605,0
Temperatura no cilindro [K]	1159,7	1621,3	1615,2	1605,0

Fonte: CTM-UFMG.

Tabela 15 – Condições iniciais para gases nas fronteiras

Admissão	Fração Mássica [ $x_i$ ]
$O_2$	0,23
$N_2$	0,77
Cilindro	
$O_2$	0,0089
$N_2$	0,7115
$CO_2$	0,1774
$H_2O$	0,0786
CO	0,0196
NO	0,0027
OH	6,0002e-05
$H_2$	0,0005
$CH_4$	8,0002e-05
$IC_8H_{18}$	9,0003e-05
$C_6H_5CH_3$	0,1615
$C_6H_6$	0,0002
$C_5H_5$	4,0001e-05
Exaustão	
$O_2$	0,0094
$N_2$	0,7159
$CO_2$	0,1775
$H_2O$	0,0792
CO	0,0180

### 3.8 Combustíveis Utilizados

A composição do combustível também é um importante parâmetro de entrada no modelo computacional. Para este estudo, as composições dos combustíveis foram retiradas do trabalho de (COTA, 2018) e as espécies que os compõem são: isoctano ( $IC_8H_{18}$ ), tolueno ( $C_6H_5CH_3$ ), heptano ( $NC_7H_{16}$ ), hepteno ( $C_7H_{14}$ ), etanol ( $C_2H_5OH$ ). Além disso, o combustível E100 é hidratado. As frações mássicas são apresentadas na Tabela 16:

Tabela 16 – Composição das misturas de Gasolina e Etanol

Combustível	Fração Mássica [ $x_i$ ]					
	$IC_8H_{18}$	$C_6H_5CH_3$	$NC_7H_{16}$	$C_7H_{14}$	$C_2H_5OH$	$H_2O$
E22	0,195	0,340	0,083	0,134	0,246	0
E50	0,128	0,223	0,054	0,085	0,511	0
E85	0,040	0,070	0,017	0,028	0,845	0
E100	0	0	0	0	0,949	0,051

Fonte: (COTA, 2018)

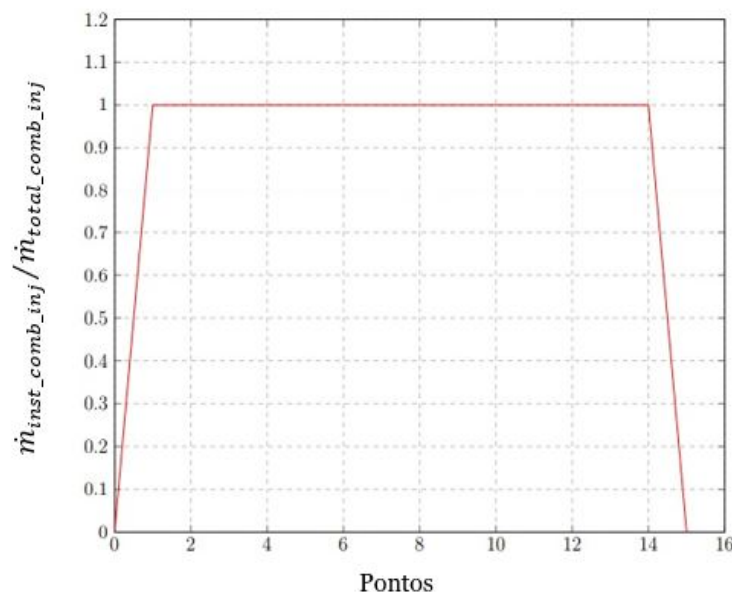
### 3.9 Injeção e Atomização do Combustível

Para a injeção de combustível foram fornecidos as posições dos furos, as direções dos jatos e o ângulo de cone para cada um dos 7 orifícios do injetor BOSCH HDEV 5.1 obtidos de um estudo publicado por (REIS, L.M.; DOMINGOS, D.; CASTRO, F.; EXPEDITO, M.; MOLINA, 2016). Esses dados são apresentadas na Tabela 17. O perfil de injeção de combustível tem forma trapezoidal e é mostrado na Figura 29, em que no eixo da ordenada tem-se a razão entre a vazão mássica instantânea de combustível injetada ( $\dot{m}_{inst-comb-inj}$ ) e a vazão total mássica de combustível injetado ( $\dot{m}_{total}$ ). No eixo da abscissa é colocado a quantidade de pontos utilizados para discretizar o perfil de injeção. Com o perfil de injeção discretizado e informações de massa total de combustível injetado, pressão e duração da injeção do combustível o programa calcula para cada caso o coeficiente de descarga de bocal do injetor e a velocidade de injeção do combustível.

Tabela 17 – Posicionamento e direção dos furos do injetor BOSCH HDEV 5.1

Número do orifício	Posições do injetor			Direção dos Jatos		
	x[m]	y [m]	z[m]	x[m]	y [m]	z[m]
1	3,92e-02	-5,49e-05	3,60e-03	-8,16e-01	3,2e-05	-5,77e-01
2	3,92e-02	-4,74e-04	3,60e-03	-6,68e-01	-1,37e-01	-7,32e-01
3	3,90e-02	-7,09e-04	-6,62e-02	-6,68e-01	-4,11e-01	-6,26e-01
4	3,87e-02	-3,58e-04	4,60e-03	-9,01e-01	-2,30e-01	-3,68e-01
5	3,87e-02	3,13e-04	4,69e-03	-9,00e-01	2,34e-01	-3,68e-01
6	3,88e-02	7,24e-04	4,32e-03	-6,59e-01	4,12e-01	-6,28e-01
7	3,91e-02	5,59e-04	3,78e-03	-6,66e-01	1,37e-01	-7,33e-01

Figura 29 – Perfil de injeção de combustível



Na Tabela 18 são apresentados dados referentes a injeção de combustível retirados dos experimentos.

Tabela 18 – Parâmetros medidos utilizados como dados de entrada nos modelos numéricos

Parâmetros	E22	E50	E85	E100
Razão volumétrica de compressão	11,5:1	11,5:1	11,5:1	11,5:1
Razão de equivalência ar-combustível	1,00	1,00	1,00	0,99
Início da injeção de combustível [°]	-270,0	-300,0	-300,0	-319,0
Duração da injeção de combustível [°]	33,9	37,2	43,1	49,1
Massa de combustível por ciclo [mg]	23,6	26,4	31,1	34,5
Temperatura do combustível na linha [K]	293,2	293,2	293,2	293,2

Fonte: CTM-UFMG

O processo de atomização do combustível, foi simulado usando os modelos Blob, para a quebra primária do *spray* de combustível, e o modelo KH-RT, para representar a quebra secundária. Os valores para as constantes desse modelo foram retirados do estudo publicado por (BRAGA et al., 2017), com valores 0,61, 7,00, 1,00 e 0,50 para  $B_0$ ,  $B_1$ ,  $C_b$  e  $C_3$ , respectivamente. O comprimento de quebra  $L_b$  no modelo de RT foi considerado nulo para que os modelos KR e RT pudesse atuar desde o momento da inserção das parcelas de combustível no domínio. Para cada caso simulado, calculou-se com base na pressão de injeção de combustível, duração da injeção e massa injetada o coeficiente de descarga dos bocais dos injetores, os quais são mostrados na Tabela 19.

Tabela 19 – Coeficiente de descarga

Combustível	cv
E22	0,757
E50	0,767
E85	0,779
E100	0,752

A partir do momento em que o *spray* de combustível passa pelo processo de quebra em gotas cada vez menores, a vaporização do combustível é um processo importante na formação da mistura ar-combustível que passa a ser considerado. Esse processo foi modelado usando a correlação de Frossling, que calcula a taxa de variação do raio da gota de combustível líquido no tempo com base na difusividade de massa do vapor de combustível (RICHARDS K. J.; POMRANING, 2007). O coeficientes  $D_0$  e  $n_0$  foram calculados por média ponderada dos coeficientes individuais das espécies combustíveis e suas respectivas frações mássicas, como mostrado na Equação 3.2. Os valores obtidos usados no cálculo da difusividade mássica do combustível na fase vapor são apresentados na Tabela

20. Para o combustível E100, foi utilizado os coeficientes de difusividade recomendados pelo programa.

$$\begin{aligned} D_0 &= \sum_{i=1}^N D_{0,i} * x_i \\ n_0 &= \sum_{i=1}^N n_{0,i} * x_i \end{aligned} \quad (3.2)$$

Tabela 20 – Coeficientes de difusividade mássica

Combustível	$D_0$	$n_0$
E22	7,359e-6	1,74
E50	8,46e-6	1,75
E85	9,853e-6	1,76
E100	1,050e-5	1,77

Durante o desenvolvimento do presente estudo, a difusividade mássica se mostrou um parâmetro relevante na formação de mistura ar-combustível para rotações relativamente baixas. Os casos simulados foram selecionados de forma que esse parâmetro não tivesse maior relevância que o transporte turbulento de espécies e O teste realizado para avaliá-lo é descrito no Anexo B.

O modelo de colisão de gotas aplicado ao modelo é o NTC. Enquanto o modelo de interação com do *spray* de combustível com a parede da câmara de combustão consiste no modelo de O'Rourke, com base no número de Weber, espessura de filme de combustível líquido e viscosidade. Este modelo foi escolhido em função do custo computacional e com base em um teste apresentado no trabalho de Braga (2018) em que se comparou os modelos de O'Rourke e Bai-Gosman para a formação de filme líquido na parede. O arrasto das gotas foi modelado utilizando o modelo dinâmico TAB.

### 3.10 Modelo de Combustão Utilizado

O *solver* de combustão de química detalhada SAGE foi utilizado apenas na etapa de combustão, devido ao seu alto custo computacional com a solução das equações de transporte e solução da cinética química para todas as espécies. Ele é ativado para todos os casos analisados a partir de  $-25^\circ$  de ângulo de virabrequim. Para garantir bons resultados em relação as emissões de poluentes, o *solver* permanece ativado até o ângulo de virabrequim correspondente a abertura das válvulas de exaustão ( $136^\circ$ ). Após esse ângulo, não são mais calculadas reações químicas e apenas o transporte das espécies continua a ser resolvido. A temperatura mínima é de 600 K e a fração molar específica de HC  $1e-10$ , que são valores recomendados pelo programa.

Juntamente com esse *solver*, é utilizado o mecanismo cinético químico desenvolvido no trabalho de Cota (2018) e avaliado em simulações computacionais tridimensionais no trabalho de Vaz (2018). Com 75 espécies e 343 reações, o mecanismo descreve as reações cinéticas químicas que ocorrem durante combustão. Representando as frações de compostos alcanos, olefinas e aromáticos na gasolina foram consideradas as espécies químicas: isoctano, n-heptano, hepteno e tolueno. Esse mecanismo também contém reações de combustão do etanol, que está presente nas várias misturas de combustíveis usadas na etapa experimental.

No modelo computacional, é adicionado um termo fonte na equação de energia para representar a ignição do combustível, sendo esta dividida em duas fases: *breakdown* e *glow discharge*. Na fase *breakdown*, 32 mJ de energia são liberados em um curto intervalo de tempo com duração de  $0,5^\circ$  de virabrequim e na fase de *glow discharge* 32 mJ de energia com duração de  $18^\circ$  (correspondentes a 1 ms e rotação de 3000 rpm) para todos os casos estudados.

### 3.11 Emissões de Poluentes Analisadas

As emissões das espécies  $\text{NO}_x$ , HC, CO e  $\text{CO}_2$  sem a presença de catalisadores na exaustão do motor monocilíndrico de pesquisa foram obtidas pelo método de resolução da combustão por química detalhada. A avaliação das emissões acontece em três etapas. A primeira consiste na comparação do desempenho do motor nas simulações com dados experimentais, pois as emissões estão diretamente relacionadas a isso. Por se tratar de um trabalho inserido em um projeto que envolve outros trabalhos, são utilizados nessa análise alguns resultados em comum com o trabalho de Vaz (2018). Nessa etapa, são comparados dados referentes a pressão no cilindro, intervalos de queima e temperatura no cilindro para o terceiro ciclo de simulação do funcionamento do motor. As curvas de temperatura da carga no cilindro foram obtidas dos modelos numéricos unidimensionais feitos por Vaz (2018). Além disso, para se discutir os resultados nessa etapa, comparou-se a formação do radical OH para os combustíveis E22 e E85, visando entender o comportamento do mecanismo cinético químico de reação.

A segunda etapa consiste no cálculo dos índices de emissões numéricos e na comparação destes resultados com índices de emissões calculados a partir dos dados experimentais. Nessa etapa, procurou-se identificar as tendências de emissões numéricas, as quais foram comparadas com as tendências de emissões dos experimentos e da literatura.

Por último, imagens da distribuição espacial dos poluentes NO e CO para o combustível E85 são discutidas em uma análise qualitativa da formação dessas espécies. São feitas correlações entre a temperatura no cilindro e a formação de NO e distribuição de combustível na câmara de combustão com a formação de CO. Os ângulos de virabre-

quim foram selecionados considerando-se picos de pressão e temperatura no cilindro e concentração máxima de CO.

### 3.11.1 Cálculo dos Índices de Emissões

Dos experimentos, foram obtidos valores de frações volumétricas dos poluentes em base seca, os quais são apresentados na Tabela 21. Para as medições de HC, tem-se a quantidade em equivalente de hexanos ( $C_6H_{14}$ ). Observa-se na Tabela, que a emissão experimental de NO<sub>x</sub> para o combustível E50 foi maior que o E22. De acordo com dados de temperatura da carga no cilindro obtidos do modelo computacional unidimensional desenvolvido por Vaz (2018) para os dados experimentais, o pico de temperatura no cilindro para o E50 também foi maior em relação ao combustível E22, justificando um maior teor de NO<sub>x</sub> nos gases de exaustão.

Tabela 21 – Dados experimentais de emissão de poluentes

Combustível	E22	E50	E85	E100
vol CO [%]	0,43	0,69	0,42	0,63
vol NO <sub>x</sub> [ppm]	3063,0	3417,0	2469,0	2162,0
vol CO <sub>2</sub>	13,7	13,2	13,4	13,6
vol HC [ppm]	185,0	265,0	75,0	60,0

Fonte: CTM-UFG

Os índices de emissões para esses dados foram calculados conforme metodologia apresentada no trabalho de Netto (2017). Assumindo-se a hipótese de gás ideal, considerou-se a fração volumétrica igual a fração a molar. Outra simplificação desse modelo, dada a condição de estequiometria em que os ensaios foram realizados, é a desconsideração do oxigênio no cálculo. Além disso, a água também não é considerada no cálculo por se tratar de medições em base seca e as medições de NO<sub>x</sub> foram representadas pela espécie NO. A massa molar desses gases é então calculada pela Equação 3.3.

$$\begin{aligned}
 MM_{ex} = & MM_{HC} \times vol_{HC} \times 1e - 6 + MM_{CO} \times vol_{CO} \times 1e - 2 + \\
 & + MM_{CO_2} \times vol_{CO_2} \times 1e - 2 + MM_{NO_x} \times vol_{NO_x} \times 1e - 6 + \\
 & + MM_{N_2}(1 - vol_{HC} \times 1e - 6 - vol_{CO} \times 1e - 2 - vol_{NO_x} \times 1e - 6)
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

em que:

$MM_{HC}$  massa molar de n-Hexano  $C_6H_{14}$  – 86,18 kg/mol

$MM_{CO}$  massa molar do CO - 28,01 kg/mol

$MM_{CO_2}$  massa molar do  $CO_2$  - 44,01 kg/mol

$MM_{NO_x}$  massa molar de  $NO_x$ , considerado NO - 30,01 kg/mol

$MM_{N_2}$  massa molar do  $N_2$  - 28,01 kg/mol

$vol_{HC}$  fração volumétrica de HC [ppm]

$vol_{CO}$  fração volumétrica de CO [%]

$vol_{CO_2}$  fração volumétrica de  $CO_2$  [%]

$vol_{NO_x}$  fração volumétrica de  $NO_x$  [ppm]

Considerando-se o princípio de conservação de massa, os índices de emissões são obtidos então da Equação 3.4:

$$IE_i = 1e3 \times \frac{\dot{m}_{ar} + \dot{m}_{comb}}{P_i} \frac{MM_k}{MM_{ex}} vol_k \quad [\text{g/kWh}] \quad (3.4)$$

em que  $\dot{m}_{ar}$  é vazão mássica de ar e  $\dot{m}_{comb}$  é a vazão mássica de combustível, ambos em kg/h.  $P_i$  é a potência indicada.

Para o cálculo dos índices de emissões numéricos, considerou-se a massa dos poluentes no ângulo de virabrequim em  $136^\circ$ , ângulo em que o *solver* de química detalhada é desabilitado e não é mais calculada nenhuma reação química. Esse ângulo corresponde também a abertura das válvulas de exaustão. Considera-se neste momento a composição dos gases do cilindro como resultado da combustão. Sendo a massa injetada de combustível um dado de entrada na simulação, considerou-se nos cálculos dos índices as vazões mássicas de combustível experimentais, que estão resumidas na Tabela 22.

Tabela 22 – Vazão mássica de combustível

Combustível	Vazão mássica [kg/h]
E22	2,1
E50	2,4
E85	2,8
E100	3,1

Fonte: CTM-UFG

Para que a base de análise seja a mesma dos dados experimentais, calculou-se as frações mássicas das espécies em base seca e obteve-se a vazão mássica de cada poluente. As potências indicadas numéricas foram obtidas pela Equação 3.5. Os índices de emissão de poluentes foram obtidos segundo a Equação 3.6 conforme Heywood (1988):

$$P_i = \frac{NIMEP \times Vd}{1,2e6} * n \quad [\text{kW}] \quad (3.5)$$



$$IE_{num} = \frac{\dot{m}_{comb}}{P_i} \quad [\text{g/kWh}] \quad (3.6)$$

A partir dos resultados obtidos nesses cálculos, a tendência de aumento ou redução das emissões, aumentando-se o conteúdo de etanol nos combustíveis, foi investigada. Para justificar os resultados encontrados, dados referentes a formação de mistura nos modelos numéricos foram utilizados, tais como razão de equivalência combustível-ar média e local e massa de ar aprisionada no cilindro numérica e experimental referente a cada caso. Ademais, com base na revisão bibliográfica realizada sobre o assunto, é avaliada a influência da formação da mistura nas emissões com o objetivo de melhor compreender os resultados obtidos

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo apresenta os resultados dos modelos computacionais desenvolvidos no presente trabalho, os quais estão divididos em: teste de malha, desempenho destes modelos e análise das emissões de poluentes. Resultados relevantes do processo de combustão são apresentados, para auxiliar na análise de emissões. Esta, foi subdividida na apresentação dos índices de emissões experimentais e numéricos, os quais foram comparados com ênfase em tendência de aumento ou redução de poluentes a medida em que aumentou-se a fração volumétrica de etanol nos combustíveis. Posteriormente, são apresentadas imagens da distribuição das espécies NO e CO ao longo do processo de combustão correlacionando-se com a temperatura, pressão e distribuição local de  $\phi$ .

### 4.1 Resultados do Teste de Malha

Na Tabela 23, é apresentada a quantidade de células nos modelos computacionais em função do nível de AMR aplicado. Nesta Tabela, são apresentados os números máximos de células, os quais foram alcançados no ângulo de abertura da válvula de exaustão ( $136^\circ$ ), e o número de células referente ao ângulo de virabrequim em que foram avaliadas as malhas na frente de chama. O AMR 5 não apresenta número máximo de células, pois nessa simulação ocorreu extrapolação da temperatura e dadas as limitações de tempo para a realização do trabalho, não foi possível resolver essa divergência a tempo de executar as simulações computacionais. Com isso, tem-se para essa simulação dados até o ângulo de eixo de  $-5^\circ$ , o que levou essa malha a ser desconsiderada nas outras etapas do teste.

Tabela 23 – Número de células do domínio

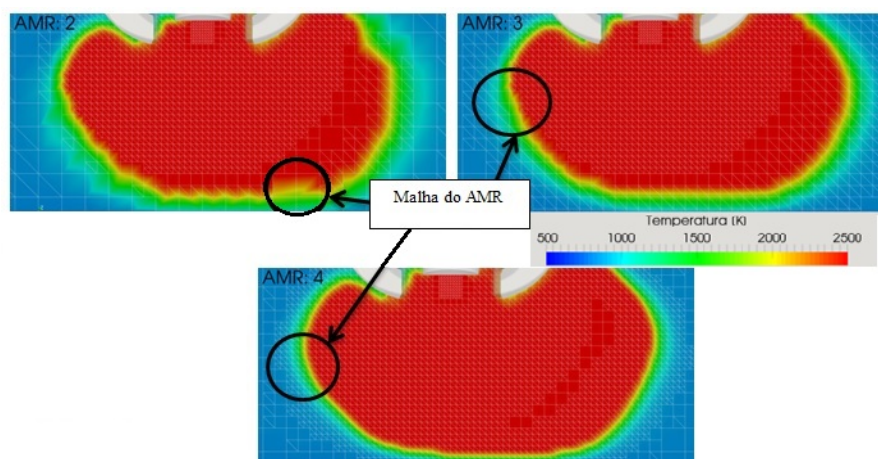
AMR	Número de células máximo	Número de células em $-10^\circ$ APMS	Diferença [%]
2	501 000	138 625	59,47
3	1 301 000	280 945	17,86
4	5 000 000	342 043	0

A diferença percentual entre as malhas foi calculada em relação ao maior número de células entre os refinamentos no ângulo de  $-10^\circ$  e o AMR 2 apresentou a maior diferença, com 59,47%. A diferença entre os números de elementos dos AMR's 3 e 4 não são tão expressivas. O custo computacional das simulações é apresentado na Tabela 24 em relação a quantidade de processadores utilizados nas simulações. Mesmo utilizando uma maior quantidade de núcleos, o AMR 4 apresentou o maior custo representando 2,6 vezes a mais que o AMR 3 e 2,95 vezes a mais que o AMR 2.

Tabela 24 – Quantidade de núcleos computacionais utilizados nas simulações

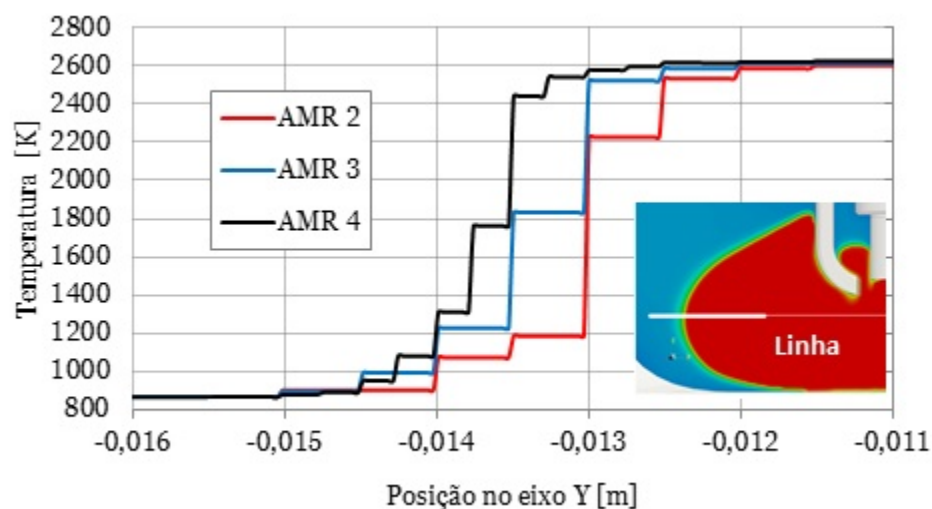
AMR	Núcleos computacionais	Horas de simulação
2	18	38
3	18	43
4	96	112

A Figura 30, apresenta imagens da temperatura da carga ao longo de uma seção transversal da câmara de combustão que passa pelo eixo de simetria da vela de ignição. Em torno da vela de ignição, foi aplicado refinamento de malha fixo para todos os casos simulados com tamanho de célula 0,25 mm. As malhas resultantes dos AMR's utilizadas para temperatura e para o instante de tempo analisado, compreendem as regiões com temperaturas no intervalo de 1000 - 2500 K ( em cores azul, verde, amarelo e vermelho). Nesta Figura são destacados alguns volumes das malhas obtidas.

Figura 30 – Temperatura da carga no cilindro no ângulo de virabrequim  $-10^\circ$ 

Curvas de temperatura da carga em função da posição de uma linha traçada no plano são apresentadas na Figura 31. Observa-se que a malha mais refinada (AMR4), ao longo do eixo das ordenadas e para uma mesma distância, é mais sensível a mudanças de temperatura. Além disso, a diferença de temperaturas entre as malhas chega a 44,44% entre as malhas AMR 4 e AMR 3 e 50,00% entre as malhas AMR 3 e AMR 2 no intervalo de  $-0,013$  m a  $-0,014$  m, que podem influenciar na oxidação do combustível e na formação de poluentes. Nesta Figura, também observa-se que para o intervalo no eixo da abscissa entre  $-0,0145$  m e  $-0,0160$  m, onde se tem temperaturas da carga próximas a 800 K, e para o intervalo entre  $-0,011$  m e  $-0,0125$  m com temperaturas próximas a 2600 K as curvas de AMR3 e AMR4 são próximas, o que indica uma caracterização da frente de chama similar para essas malhas.

Figura 31 – Curvas de temperatura da carga no cilindro

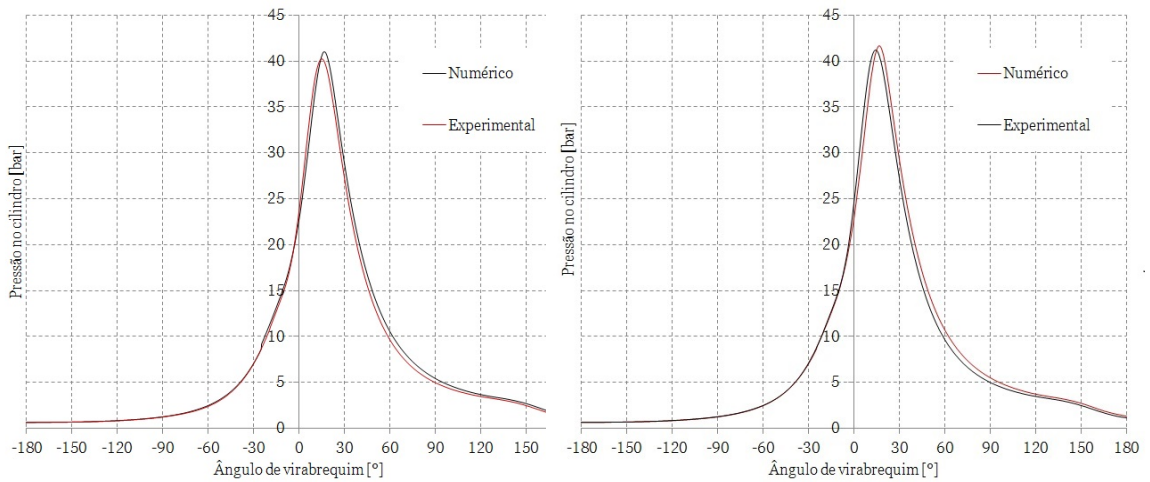


Pode-se concluir com este teste de malha, que os resultados numéricos não atingiram a independência da malha. Entretanto, com os recursos computacionais disponíveis para a realização do presente estudo, tempo para a realização do trabalho e pela caracterização da frente de chama entre as malhas AMR3 e AMR4 serem próximas, a malha escolhida foi a AMR 3. A malha AMR 4 apresentou custo computacional inviável e a malha AMR 2 uma baixa resolução nos resultados.

## 4.2 Desempenho dos Modelos Computacionais 3D com o Mecanismo de COTA, 2018

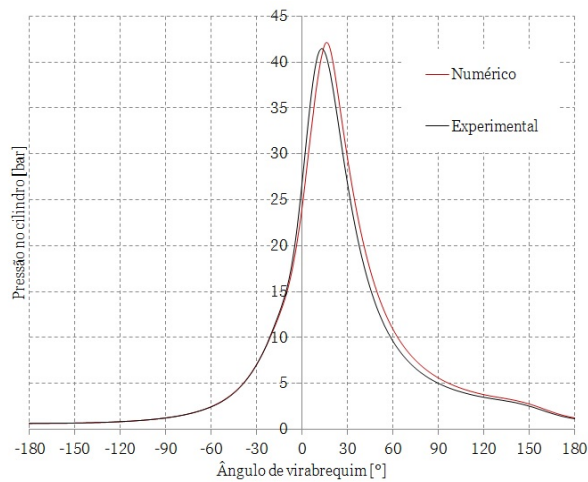
Pela comparação das pressões médias efetivas numéricas e experimentais, foram encontradas diferenças menores que 9% exceto para a mistura E100, com diferença percentual de 13,5%. As pressões de picos apresentaram diferenças menores que 2% a partir da mistura E50 e uma diferença de 11,03% para o E22. A Figura 32, apresenta as curvas de pressão no cilindro para os combustíveis E50, E85 e E100. Observa-se nesta figura, que as curvas numéricas e experimentais estão bem correlacionadas na fase de admissão da mistura, mas na combustão estão visivelmente deslocadas. Diferenças de fase em curvas de pressão no cilindro estão relacionadas a transferência de calor durante a queima do combustível, cujos resultados são analisados ao longo deste capítulo, e impactam diretamente os resultados de temperatura da carga no cilindro. A comparação entre as pressões médias efetivas é resumida na Tabela 25.

Figura 32 – Curvas de pressões no cilindro



(a) E50

(b) E85



(c) E100

Fonte: (VAZ, 2018)

Tabela 25 – Comparação das pressões médias efetivas

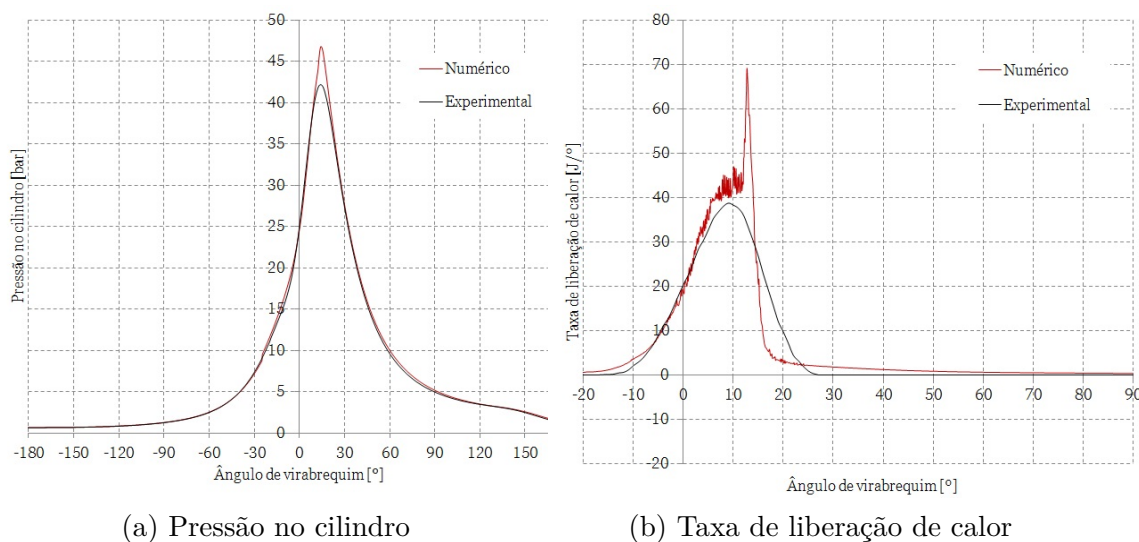
Combustível	E22	E50	E85	E100
IMEP experimental [bar]	7,09	7,16	7,71	7,09
IMEP numérico [bar]	7,43	7,70	7,14	8,05
Diferença [%]	4,75	8,27	10,30	13,54
Pressão máxima experimental [bar]	42,12	40,18	41,21	41,50
Pressão máxima numérica [bar]	46,77	40,98	41,70	42,1
Diferença [%]	11,03	1,99	1,21	1,44

Fonte: (VAZ, 2018)

O combustível E22 apresenta um comportamento na combustão muito diferente do que era esperado, em que a curva de pressão tem valor de pico cerca de 11% mais alto

que o experimental. A curva de pressão e a taxa de liberação de calor são representadas na Figura 33, onde verifica-se uma alta taxa de liberação de energia em um curto intervalo de tempo durante a combustão, a qual não é observada nas demais misturas.

Figura 33 – Resultados para combustão da mistura E22

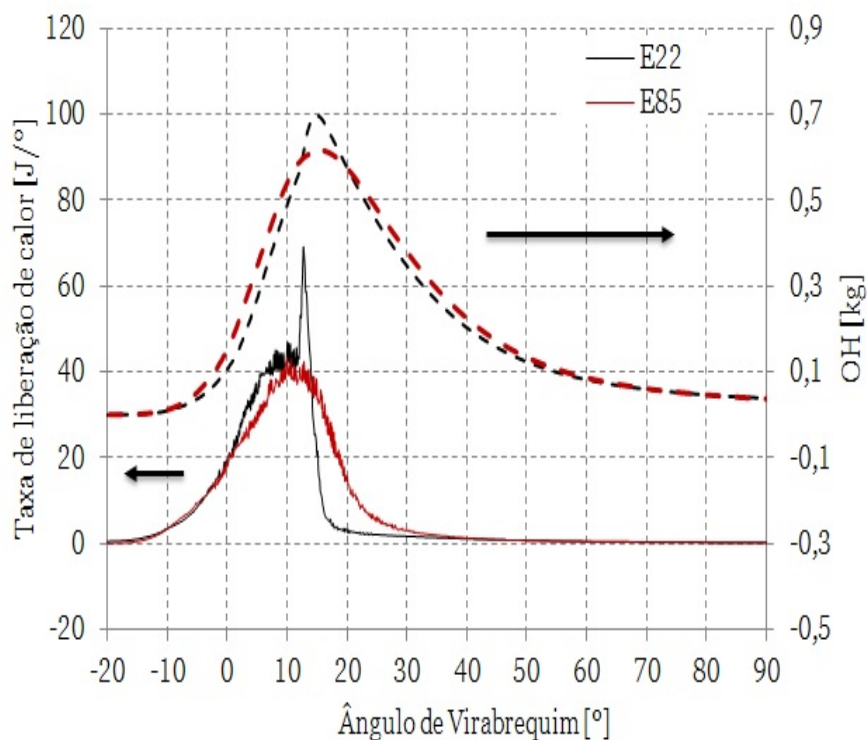


Fonte: (VAZ, 2018)

Pela comparação das massas aprisionadas no cilindro numérica e experimental, tem-se 299,23 mg e 297 mg, respectivamente. Além disso, a mistura encontra-se 3,01% mais rica nos modelos numéricos no momento da centelha. Com isso, a mistura ar-combustível para este modelo numérico apresentou bons resultados.

Na Figura 34, são apresentadas as curvas de liberação de calor e da formação do radical OH durante a combustão das misturas E22 e E85. Observa-se que o pico de OH coincide com o pico de liberação de energia e ambas as curvas para o E85 apresentam comportamento mais suave. A diferença entre os valores máximos das curvas de OH é de 19,42% e isso indica maior reatividade do mecanismo cinético químico para a combustão da gasolina. Esse comportamento foi também verificado no estudo de Cota (2018), em que o mecanismo cinético químico apresentou menor atraso de ignição para esse combustível em relação as misturas com maiores frações de etanol. A alta taxa de formação do radical OH tem grande influência na formação de CO devido as reações de terceiro corpo.

Figura 34 – Formação de OH na combustão das misturas E22 e E85



Fonte: (VAZ, 2018)

Os ângulos de queima são mostrados na Tabela 26. Nesta tabela, observa-se que as maiores diferenças encontradas estão por volta de 43,08% para MBF 50. Para o combustível E22, a primeira fase da queima apresentou a menor diferença (7,41%). Além disso, são observadas para a segunda fase da queima (MBF 50 -90) durações maiores da combustão no cilindro em comparação com o experimental, em todos os casos.

Tabela 26 – Comparação dos ângulos de queima

Combustível	E22	E50	E85	E100
MBF50 experimental [°]	7,75	8,12	7,88	6,95
MBF50 numérico [°]	8,33	10,57	6,95	9,95
Diferença [%]	7,41	30,09	30,69	43,08
MBF10-50 experimental [°]	9,95	10,24	10,26	10,78
MBF10-50 numérico [°]	9,00	11,93	11,91	12,38
Diferença [%]	14,74	16,57	16,08	14,81
MBF50-90 experimental [°]	9,56	10,00	10,40	11,99
MBF50-90 numérico [°]	10,12	12,67	12,82	13,76
Diferença [%]	5,91	10,40	13,75	14,75
MBF10-90 experimental [°]	19,51	20,24	20,67	22,77
MBF10-90 numérico [°]	21,54	24,61	24,73	26,13
Diferença [%]	10,42	21,60	19,67	14,78

Fonte: (VAZ, 2018)

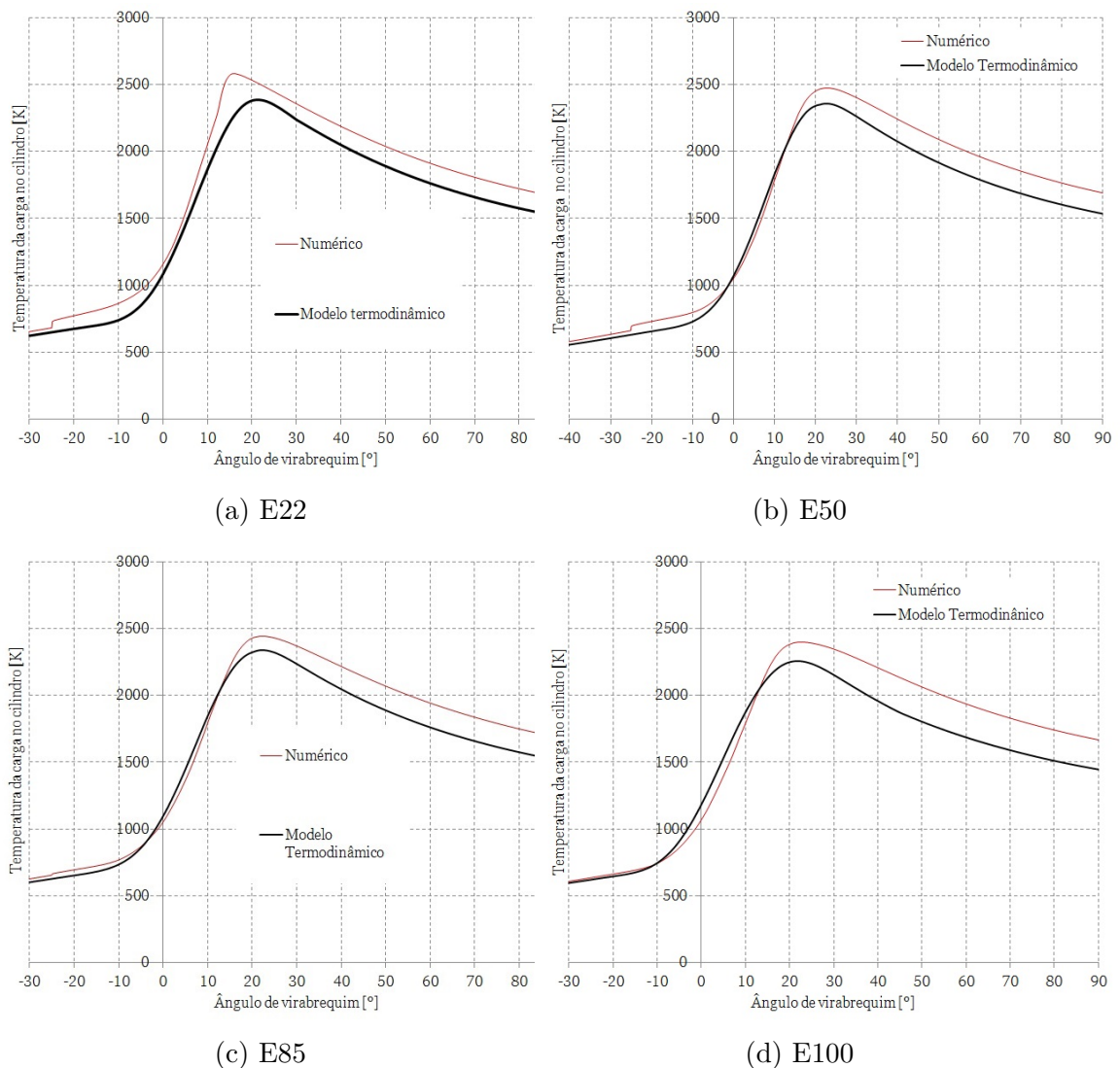
As temperaturas médias da carga no cilindro obtidas numericamente são apresentadas na Figura 35 e são comparadas com as temperaturas calculadas pelo modelo termodinâmico das simulações unidimensionais feitas no trabalho de (VAZ, 2018) usando o programa GT Power. As diferenças observadas na combustão para a segunda fase da queima, resultam em picos de temperaturas maiores assim como temperaturas maiores da carga na fase de expansão e exaustão dos gases, fases que são importantes na formação dos poluentes. Uma comparação das temperaturas máximas nessas curvas é apresentada na Tabela 27. A maior diferença encontrada foi para a mistura E22, em que a temperatura numérica é 8,4% maior. Essa diferença pode ser atribuída ao pico de liberação de calor observado na Figura 33.b.

Tabela 27 – Comparação entre temperaturas médias da carga no cilindro numéricas e obtidas dos dados experimentais

Combustível	E22	E50	E85	E100
Temperatura máxima modelo termodinâmico [K]	2385	2356	2338	2258
Temperatura máxima modelo numérico [K]	2584	2474	2443	2398
Diferença [%]	8,4	5,0	4,4	6,2



Figura 35 – Comparação entre os resultados numéricos e experimentais para as curvas de temperatura da carga dentro do cilindro

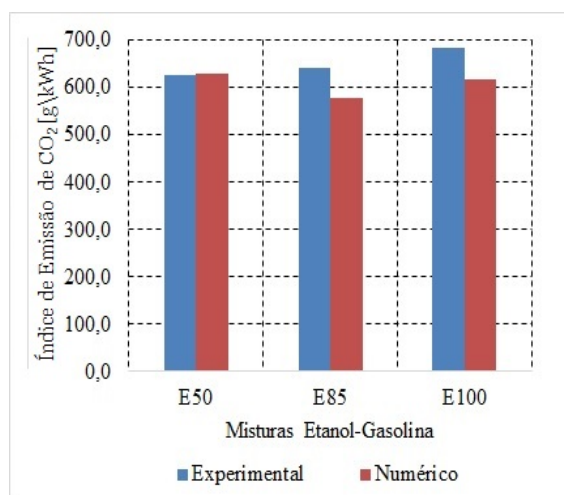


A partir dos resultados obtidos para a combustão, observa-se que para as misturas E50, E85 e E100 obteve-se um maior tempo de queima das misturas nas simulações computacionais em relação aos dados experimentais. Entretanto, apresentaram bons resultados para os picos de pressão e temperatura no cilindro. A mistura E22 apresentou boa correlação com o experimental na primeira fase da queima e a menor diferença entre as pressões médias efetivas indicadas. Porém, sua combustão anormal inviabiliza a análise de emissões de poluentes. Assim, são discutidos os resultados de emissões apenas para as outras misturas de gasolina e etanol.

### 4.3 Resultados dos Índices de Emissões

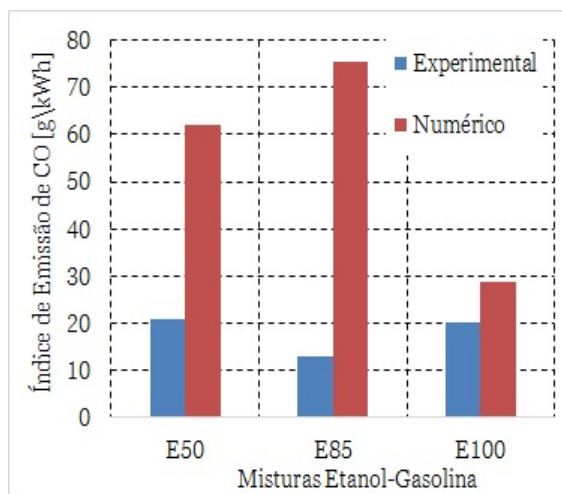
Os índices de emissões encontrados para o  $\text{CO}_2$  apresentam uma diferença mínima entre os dados experimentais e numéricos de 0,61% para o combustível E50 e para as demais misturas as diferenças foram menores que 10%. Nos dados experimentais, observa-se uma tendência de aumento da emissão desse poluente com o aumento do conteúdo de etanol no combustível, enquanto para os dados numéricos o menor índice é para o combustível E85. Esse resultado indica que o processo de combustão para este combustível teve uma qualidade inferior, o que pode ser causado pela formação de mistura, a qual será abordada posteriormente. O modelo computacional desenvolvido por [Tibaquirá et al. \(2018\)](#) também prediz maiores emissões dessa espécie a medida em que se aumenta o conteúdo de etanol em misturas deste combustível com a gasolina.

Figura 36 – Índice de emissão  $\text{CO}_2$



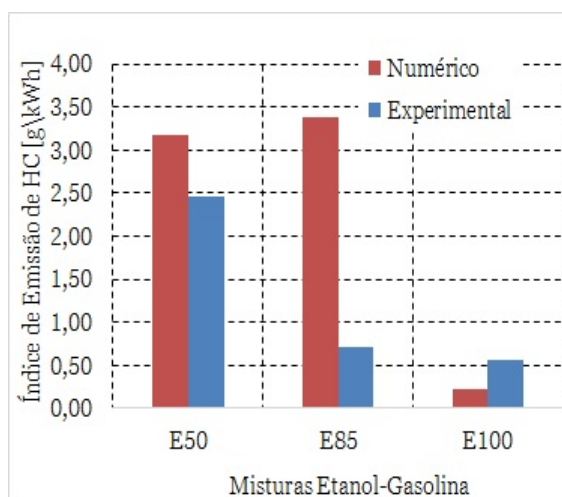
A formação de CO foi mais expressiva nos modelos numéricos em relação aos experimentais e não apresentou a mesma tendência. Na Figura 37, é possível observar um aumento de CO na mistura E85 em relação a E50 e uma redução da formação de CO na combustão da mistura E100 em relação as duas misturas. Em contrapartida, os dados experimentais indicaram uma redução desse poluente para o combustível E85 em relação ao E50 e o mesmo nível de emissões para o E100. Nos estudos revisados por [Masum et al. \(2013\)](#), com o aumento frações de etanol, a emissão de CO é reduzida.

Figura 37 – Índice de emissão CO



As emissões de HC nos dados experimentais são medidas em equivalentes de hexanos. Portanto, apenas uma fração muito pequena de HC é obtida da amostra. Ademais, os dados experimentais mostram uma tendência de redução das emissões de HC aumentando-se a concentração de etanol na mistura combustível. Essa tendência não foi observada nos dados numéricos, pois a emissão de HC para a mistura E85 foi maior do que a emissão obtida para o E50 em 6,53%. Entretanto, para o E100, a emissão desse poluente foi muito reduzida, apresentando diferença percentual de 93,28% em relação a mistura E85. Esses resultados são mostrados na Figura 38. Nos trabalhos de [Masum et al. \(2013\)](#), [Tibaquirá et al. \(2018\)](#) e [Costa e Sodré \(2010\)](#), menores emissões de HC foram obtidas para misturas mais ricas em etanol. O aumento da emissão de HC e CO e a redução de CO<sub>2</sub> para o combustível E85 em relação ao combustível E50, indicam que a formação de mistura ar-combustível pode ter influenciado nos resultados de emissões.

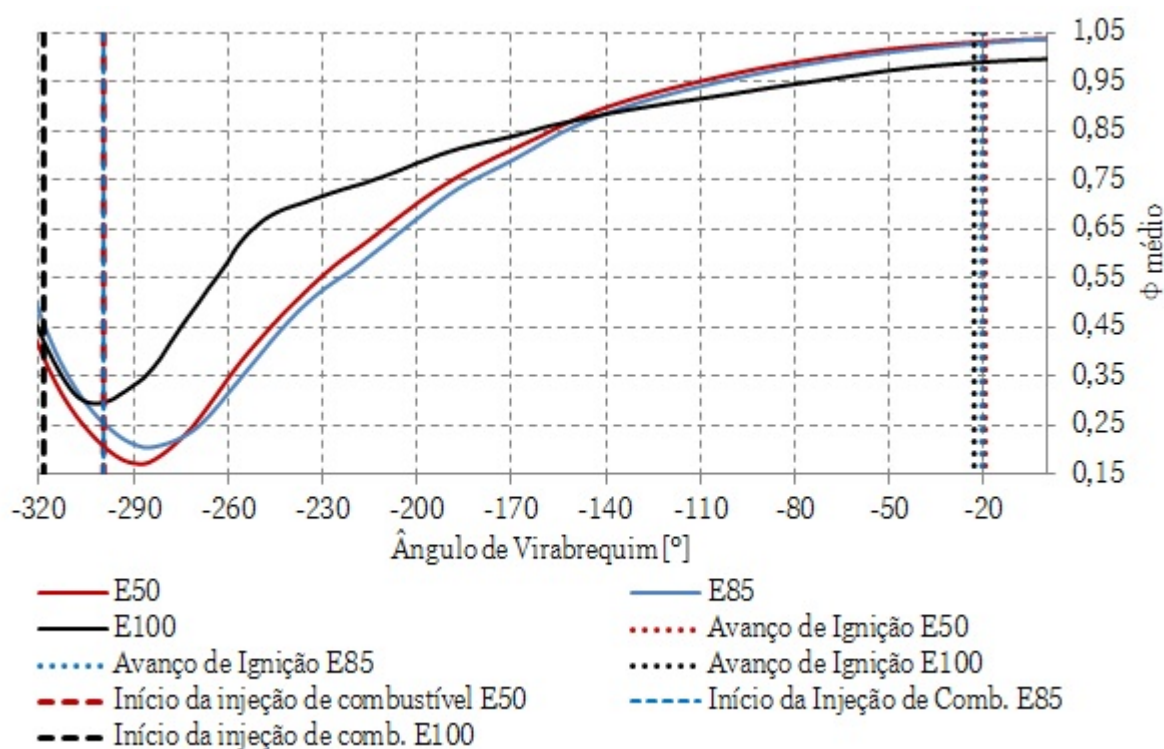
Figura 38 – Emissão de HC



Pela análise da mistura ar-combustível no cilindro, é visto que para os combus-

tíveis E50 e E85 as misturas se desviam da estequiometria em somente 3,02% e 2,89%, respectivamente, comparando-se  $\phi$  médio um grau antes da ignição da mistura. Para a mistura E100, essa diferença é de 1,0%. Embora esses resultados apresentem boa correlação com os experimentais, na Figura 39 observa-se que a mistura ar-combustível se forma mais rapidamente para o combustível E100 em relação as outras misturas. Nesta Figura, é mostrado o intervalo de  $-320^\circ$  a  $0^\circ$  do eixo virabrequim que engloba as etapas de injeção de combustível na câmara de combustão e ignição da mistura ar-combustível. Essas diferenças podem também ser observadas analisando-se a razão de equivalência local em seções transversais da câmara de combustão, que serão mostradas na Figura 40.

Figura 39 – Razão de equivalência combustível-ar média



As massas de ar aprisionadas no cilindro são apresentadas na Tabela 28. A diferença máxima encontrada entre os modelos numéricos e medições experimentais foi de 4,42%. Com isso, verifica-se que as diferenças encontradas na formação de mistura não estão relacionadas a este parâmetro.

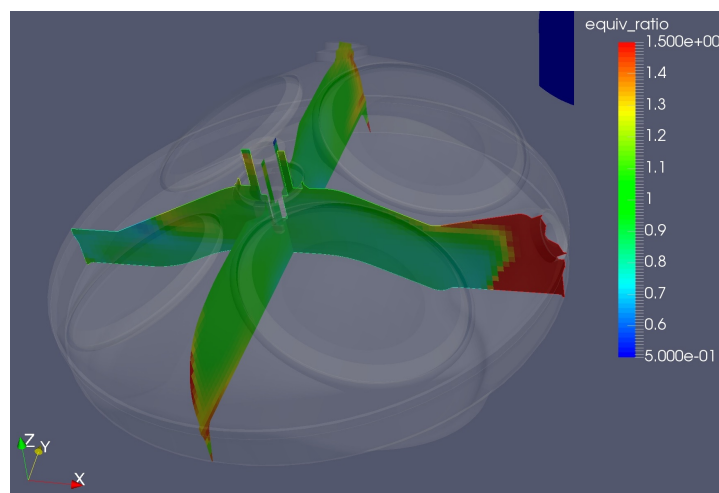
Tabela 28 – Massa aprisionada no cilindro

Combustível	Massa experimental [mg]	Massa numérica [mg]	Diferença [%]
E50	302,60	302,45	0,05
E85	289,60	302,41	4,42
E100	310,5	304,65	1,92

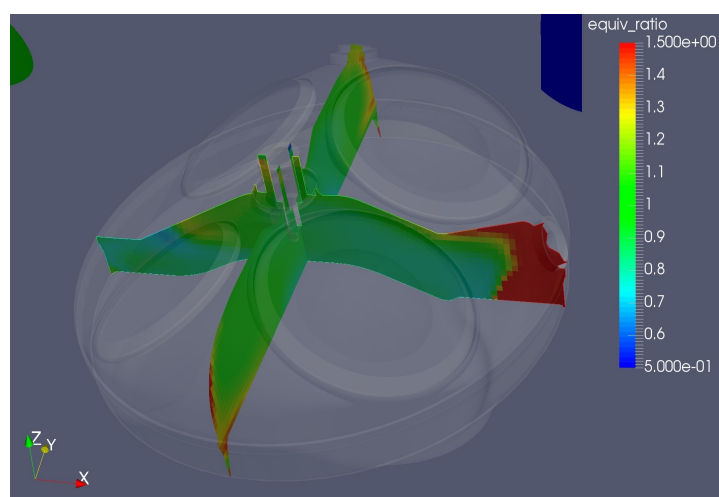
Na Figura 40, são apresentadas imagens da razão de equivalência local ( $\phi$ ) para os

três combustíveis feitas para a posição de  $1^\circ$  antes da ocorrência de centelha. As imagens 40.a e 40.b referem-se as misturas E50 e E85 e podem ser nelas observadas regiões muito ricas em combustível próximas ao injetor de combustível. Já para o E100, mostrado na Figura 40.c, a mistura em torno da centelha está mais homogênea e apresenta regiões menores em que ocorre concentração de combustível. Como foi constatado nos modelos computacionais apresentados no Anexo 2.15, onde o transporte difusivo para rotações relativamente baixas (2000 rpm) se mostrou mais relevante na formação da mistura que para rotações mais elevadas (3500 rpm), o transporte difusivo das espécies para a rotação do motor utilizada nos casos analisados pode ter influenciado na formação de mistura, favorecendo uma maior estratificação da mistura ar-combustível na câmara de combustão para os combustíveis multicomponentes.

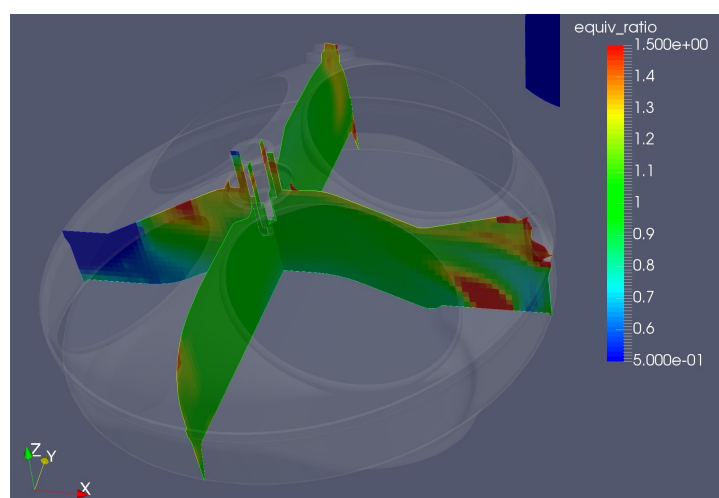
Figura 40 – Distribuição local da razão de equivalência



(a) E50



(b) E85

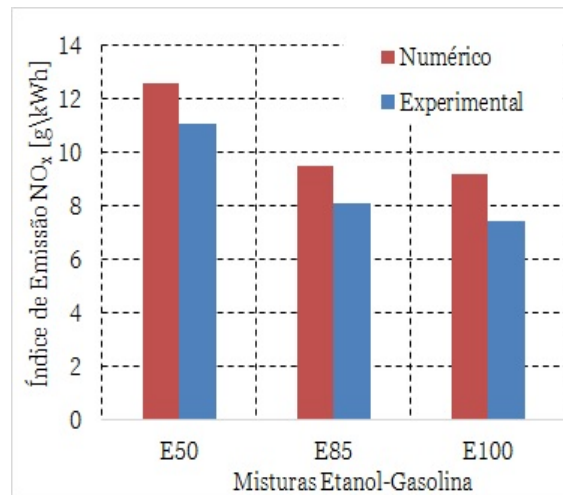


(c) E100

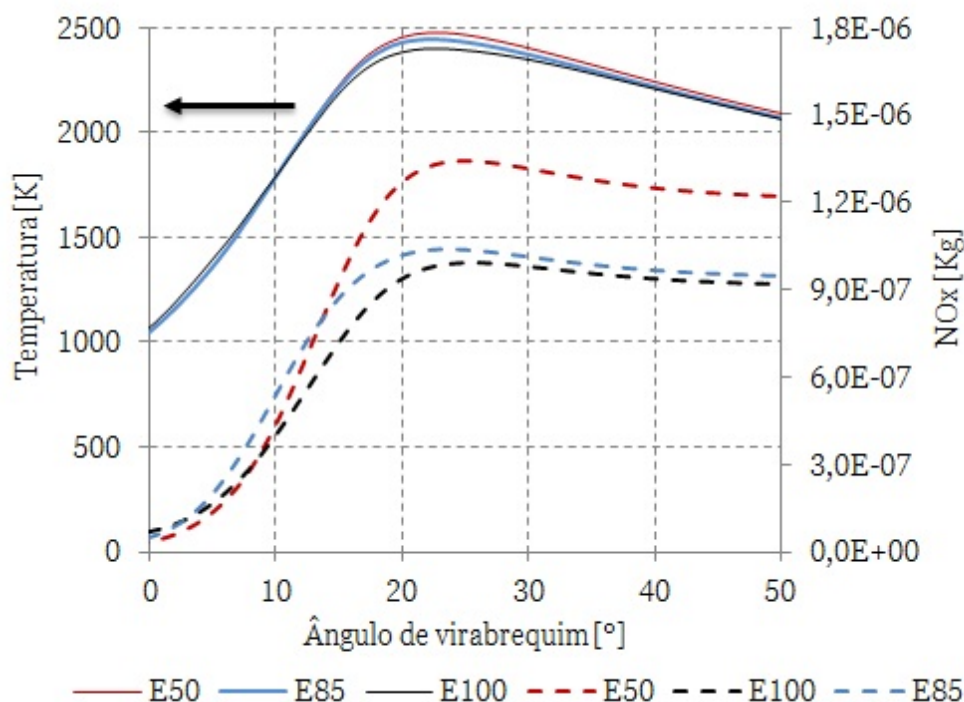
As emissões de  $\text{NO}_x$  apresentam resultados numéricos acima dos experimentais para todos os casos. Porém, tanto nos experimentos quanto nos modelos numéricos verifica-

se que a adição de etanol na mistura leva a redução deste poluente. Para os dados numéricos, entre as misturas E85 e E100 a redução foi de 3%, enquanto entre as misturas E85 e E50 essa redução foi de 24,65%. Esta tendência de redução é confirmada na literatura no estudo de [Turner et al. \(2011\)](#), em estudos revisados por ([MASUM et al., 2013](#)). Os índices de emissões numéricos são apresentados na Figura 41.

Figura 41 – Índice de emissão de  $\text{NO}_x$  para os modelos numéricos



A redução da emissão de  $\text{NO}_x$  se deve ao resfriamento da câmara de combustão, que ocorre devido ao calor latente de vaporização do combustível, o qual aumenta a medida que a fração volumétrica de etanol aumenta. Isso é mostrado pelas curvas de temperaturas médias no cilindro, apresentada na Figura 42. Esta Figura mostra que a formação de  $\text{NO}_x$  é muito sensível a variação de temperatura no cilindro, principalmente na região próxima ao pico de temperatura e pressão.

Figura 42 – Formação de  $\text{NO}_x$  em relação a temperatura no cilindro

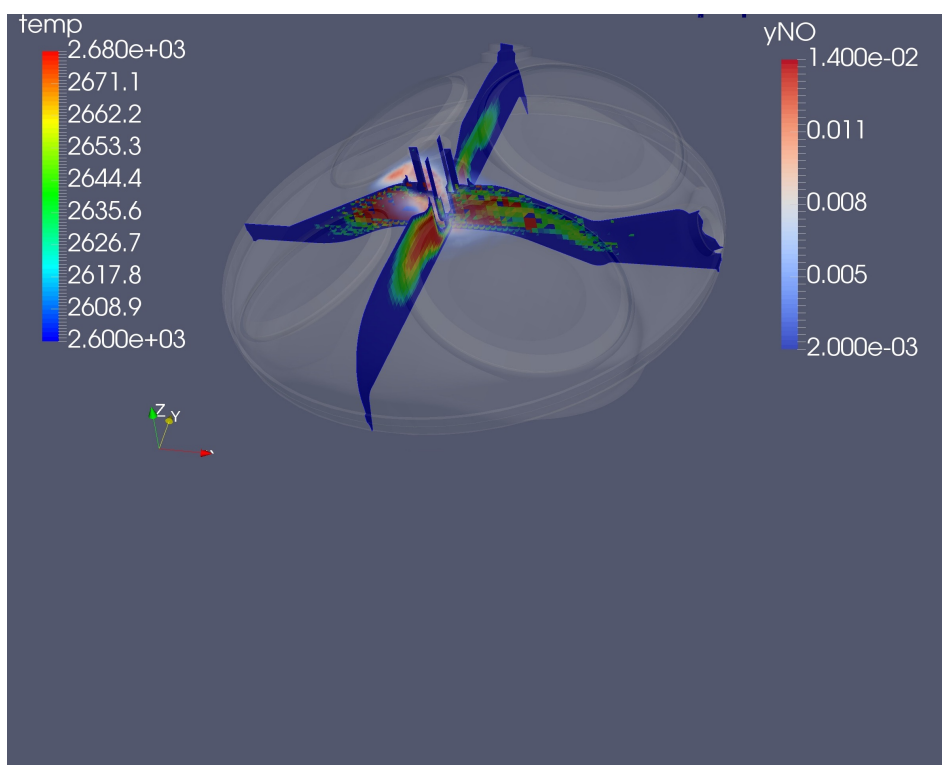
Dos resultados apresentados, verifica-se que as emissões de  $\text{NO}_x$  foram reduzidas com o aumento da concentração de etanol no combustível. Embora houve boa correlação dos dados numéricos e experimentais para massa aprisionada no cilindro e  $\phi$  médio, a formação de mistura pode ter influenciado os resultados para todos os poluentes sendo menos significativo para o  $\text{NO}_x$ . Com isso, não houve uma tendência clara de redução ou aumento da emissão a medida que se eleva a fração de etanol nas misturas de combustíveis. Para a mistura E100, observou-se uma região mais homogênea próxima a centelha dos que os demais modelos numéricos, o que justifica menores níveis de HC e maior emissão de  $\text{CO}_2$ .

#### 4.4 Resultados da Análise Qualitativa da Mistura E85

Imagens da distribuição dos poluentes ao longo da câmara de combustão foram obtidas para o combustível E85 e são apresentadas nesta seção. As Figuras 43 - 45 mostram a distribuição de NO ao longo do tempo na câmara de combustão durante o processo de combustão. Na Figura 43, é mostrado o início da formação de  $\text{NO}_x$ , no ângulo de 4° após o PMS quando a temperatura média do cilindro é de 1431 K. Entretanto, nessa Figura é possível observar regiões mais quentes próximas a centelha com temperaturas acima de 2600 K.

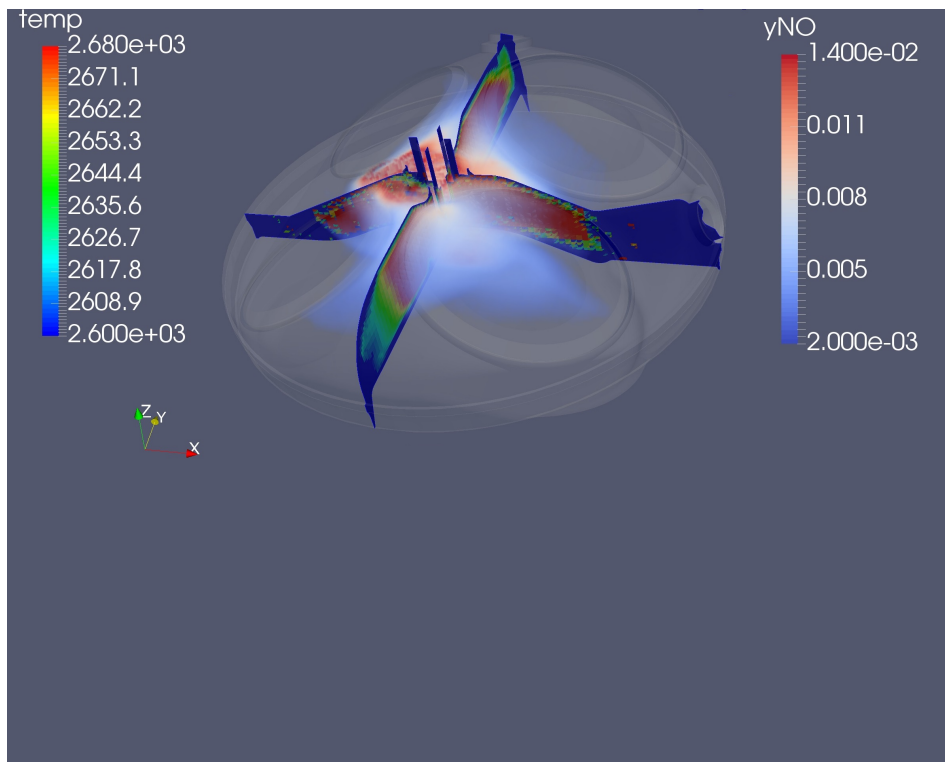


Figura 43 – NO - Início da Formação de NO



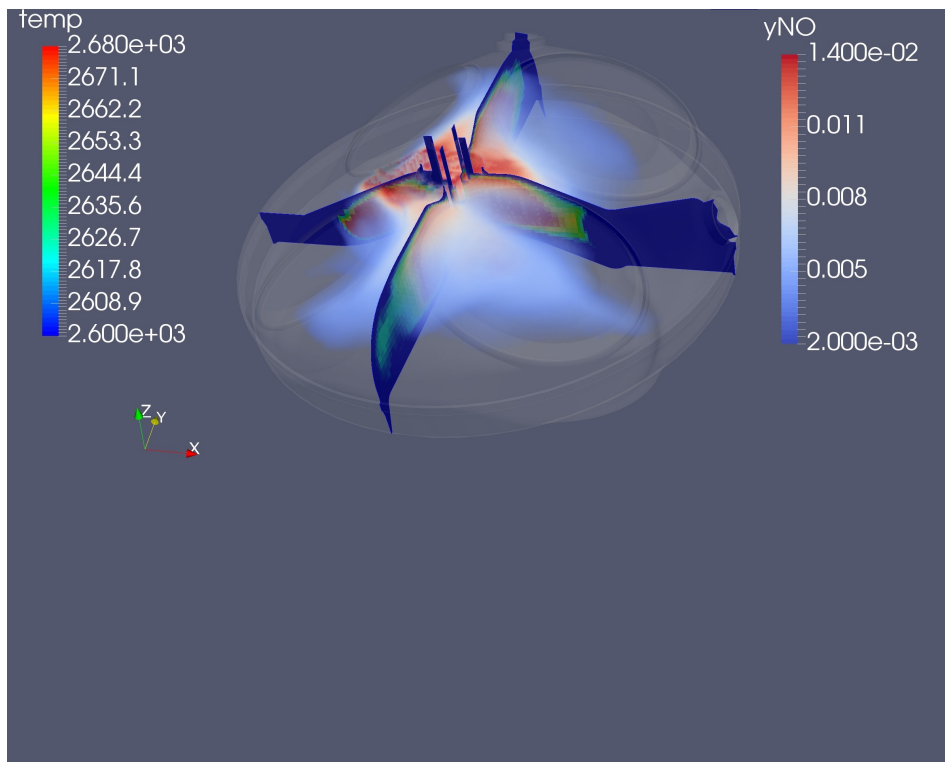
Na Figura 44, visualiza-se a formação de NO no ângulo de virabrequim de  $14^\circ$  após o PMS,  $2^\circ$  antes do pico de pressão. Nessa condição, a temperatura média da câmara é de 2170 K e a pressão média é 41,68 bar. A formação de NO é mais expressiva nas regiões próximas a centelha, onde a temperatura ultrapassa 2600 K.

Figura 44 – NO - Ângulo próximo ao pico de pressão



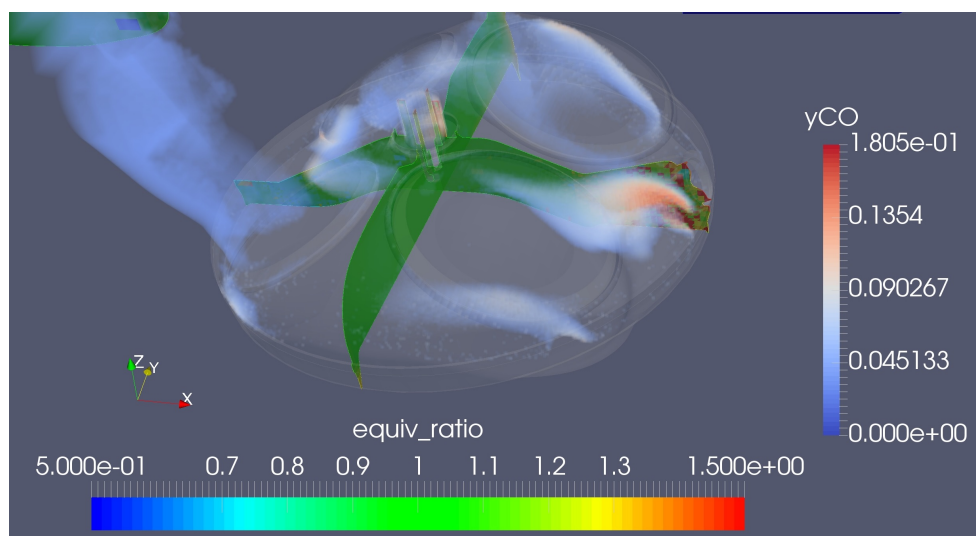
A Figura 45, apresenta a formação de NO no ângulo de 19° após o PMS, 1° antes do pico de temperatura. Comparando-se esta imagem com a Figura 44, é possível observar que o NO é mais sensível a temperatura, apresentando uma distribuição maior dessa espécie na câmara. A temperatura média no cilindro nesse ângulo é de 2321 K e pressão de 39,37 bar. A partir do ângulo de 40° após o PMS, que já corresponde a fase de expansão dos gases e resfriamento da câmara de combustão, não ocorre mais formação ou destruição de NO. Assim, na abertura das válvulas de exaustão essa espécie é expelida para fora do cilindro.

Figura 45 – NO - Ângulo próximo ao pico de temperatura



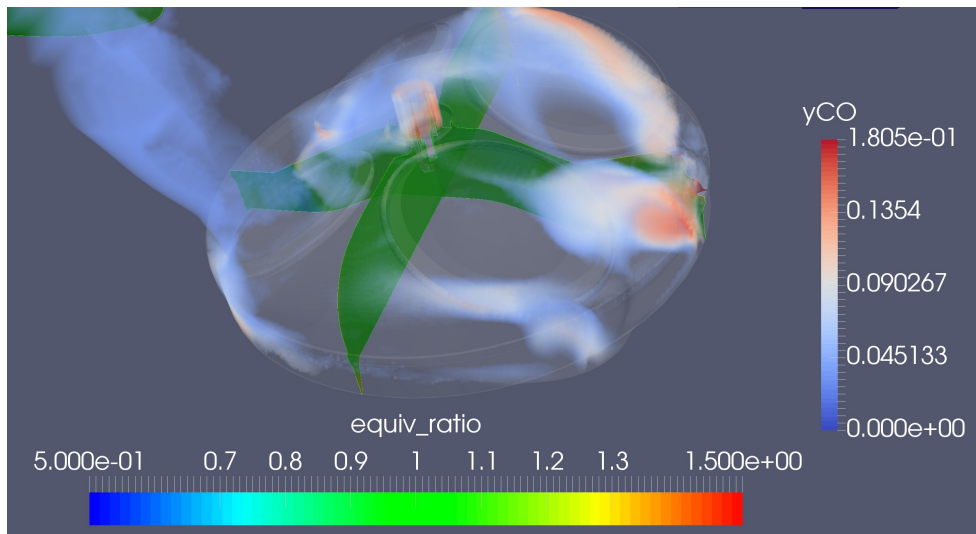
Nas Figuras 46 - 48 são mostradas a formação de CO durante a combustão e planos com razão de equivalência local. A Figura 46, corresponde ao momento em que a pressão no cilindro é máxima. Nessa Figura, verifica-se que a concentração de CO é mais proeminente nas regiões ricas em combustível.

Figura 46 – CO - Ângulo próximo ao pico de pressão



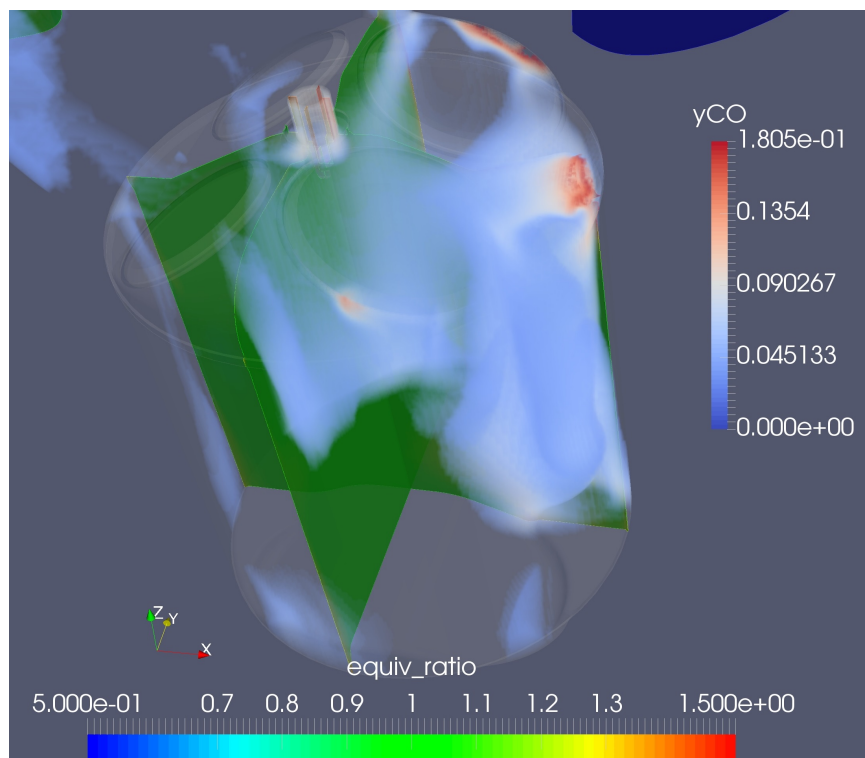
A formação de CO na câmara atinge seu máximo no ângulo de 23° e é mostrada na Figura 47. Nessa Figura, observa-se que em regiões próximas ao injetor de combustível e a válvula de admissão encontram-se as maiores concentrações desse poluente.

Figura 47 – Concentração máxima de CO



O modelo de cinética química aplicado no presente estudo fica habilitado até a abertura das válvulas de exaustão, que é o momento representado na Figura 48. Sendo assim, nessa figura está representado o total desse poluente formado na combustão e sua distribuição espacial no ângulo de virabrequim  $136^\circ$  DPMS. Para este momento, tem-se nas regiões do injetor de combustível e válvula de admissão as maiores frações desse poluente indicando que a combustão nessas regiões foi incompleta. A distribuição local de  $\phi$  para esse caso foi mostrada previamente na Figura 40 em que observa-se regiões próximas a parede do combustível excessivamente ricas em combustível.

Figura 48 – Concentração mássica de CO na exaustão



#### 4.4.1 Considerações Finais sobre os Resultados

Como foi visto no estado da arte, existem poucos estudos na literatura sobre a validação de mecanismos cinéticos químicos para análise da combustão em MCI's. Assim, o presente estudo tem grande relevância acadêmica e apresenta muitos desafios durante sua realização. Os resultados obtidos no presente trabalho indicaram a necessidade de um estudo mais aprofundado na formação de mistura. Por ter sido utilizado um sistema DI, testes em bancada da injeção de combustível para caracterizar o injetor de combustível são necessários. Dados experimentais tais como diâmetro de gota, penetração do combustível líquido no cilindro, perfil de injeção de combustível, modelos de formação de filme líquido por interação com as paredes do cilindro, taxa de evaporação do combustível em câmaras aquecidas são relevantes para um modelo numérico mais realista.

Ainda na formação de mistura, outros parâmetros e submodelos computacionais devem ser pesquisados a fundo. A difusividade mássica de combustíveis multicomponentes, como está mostrado no Anexo B, tem grande influência na distribuição do combustível no cilindro para velocidades relativamente baixas de rotação e pode ter influenciado também a formação de mistura nos casos analisados favorecendo a estratificação da mistura ar-combustível. Nos modelos computacionais, para cada combustível foi utilizado uma difusividade mássica média para todas as espécies no modelo de evaporação de gotas de combustível líquido. Para o E100, que se aproxima de um combustível monocomponente, foi aplicada a difusividade do etanol e obteve-se uma combustão mais completa.

Nas emissões, é interessante a obtenção de dados experimentais mais confiáveis. O equipamento utilizado na etapa experimental mede equivalentes de hexanos, o que representa uma parcela pequena das espécies de hidrocarbonetos não queimados na exaustão dos gases do cilindro. Combustíveis oxigenados ainda apresentam como emissões maior quantidade de aldeídos e compostos orgânicos voláteis. Estudar essas emissões é importante para o cumprimento das metas de redução de poluentes estabelecidas no novo Programa Rota 2030 e normas internacionais.

## 5 CONCLUSÃO

O presente trabalho avalia o mecanismo cinético químico reduzido desenvolvido no trabalho de (COTA, 2018) para a predição de emissões de CO<sub>2</sub>, CO, HC e NO<sub>x</sub> em modelos computacionais tridimensionais de um motor monocilíndrico de pesquisa. Para isso, o método de volumes finitos foi aplicado a esses modelos para a solução das equações de conservação e submodelos computacionais foram utilizados para modelar a combustão, *spray* de combustível, turbulência, transferência de calor dentre outros processos.

Na metodologia busca-se analisar as emissões dessas espécies ao final do processo de combustão das misturas e identificar tendências nos resultados. Os resultados são compreendidos analisando-se os dados numéricos e experimentais de pressão no cilindro, duração da queima e temperatura da carga dentro do cilindro. A partir de imagens da distribuição local de  $\phi$  e temperatura para a mistura E85, pode-se observar como a mistura ar-combustível se formou na câmara de combustão em um momento próximo a ignição. Com isso, identificam-se regiões que são mais favorecidas as formações de NO e CO. Desta forma, considera-se que o objetivo geral do trabalho foi alcançado. Dos objetivos específicos deste trabalho, conclui-se que:

- O domínio computacional foi validado pela comparação das massas aprisionadas no cilindro em que diferenças menores que 5,00% foram encontradas e apresentou para todos os casos a razão volumétrica de compressão esperada. O diagrama de válvulas foi ajustado satisfatoriamente no trabalho de (VAZ, 2018) utilizando simulações unidimensionais.
- Os parâmetros de injeção e modelos de atomização de combustível podem ser aprimorados com a obtenção de dados experimentais para caracterização do injetor de combustível e maior capacidade computacional de processamento para outros modelos computacionais;
- O transporte difusivo de espécies se mostrou muito relevante principalmente para rotações relativamente baixas, como mostrado no Anexo B e influenciou nos resultados numéricos para a rotação de 3000 rpm, indicando que a formação de mistura pode ser aprimorada;
- A partir dos resultados obtidos no processo de combustão das misturas analisadas verificou-se uma melhor representação desse processo utilizando o mecanismo cinético reduzido avaliado para os combustíveis E50, E85 e E100 e por isso, a predição de emissões dos poluentes foi avaliada para esses casos;

- As tendências de emissões observadas nos resultados foram comparadas qualitativamente com resultados encontrados na literatura.

Desta forma, concluí-se que os objetivos específicos também foram alcançados. Dos resultados apresentados, conclui-se que:

- O mecanismo cinético químico demonstrou a necessidade de ajustes para representar melhor a combustão de combustíveis multicomponentes, pois na combustão da mistura com a menor fração volumétrica de etanol a reatividade do mecanismo para a gasolina se demonstrou alta. Na combustão das misturas com maior conteúdo de etanol, o processo de combustão teve maior duração e influenciou na temperatura da carga dentro do cilindro, o que tem impacto nas emissões de poluentes,
- Obteve-se resultados satisfatórios para a massa aprisionada no cilindro e razão de equivalência combustível-ar média. Entretanto, observou-se estratificação da mistura dentro do cilindro com formação de regiões excessivamente ricas e pobres em combustível,
- Para as misturas E50 e E100, regiões com excesso de combustível favoreceram a formação de CO indicando combustão incompleta da mistura,
- A formação mais homogênea da mistura ar-combustível para o combustível E100 na região próxima a centelha e menores regiões com excesso de combustível favoreceram a queima reduzindo as emissões de HC e CO e indicando leve aumento na emissão de  $CO_2$ ,
- A emissão de  $NO_x$  apresentou tendência de redução com o aumento do conteúdo de etanol no combustível como visto na literatura.

Por fim, os desafios encontrados no trabalho são relatados e são sugeridas estratégias visando modelos numéricos mais realistas e melhora nos resultados de emissões.

## 6 SUGESTÃO DE TRABALHOS FUTUROS

Em função dos resultados obtidos neste trabalho e das limitações encontradas no período em que ele foi realizado, tem-se como sugestão para trabalhos futuros:

- Ajuste do mecanismo cinético químico para melhor representação da combustão de misturas multicomponentes,
- Teste dos mecanismos de reações químicas em sistemas pré-misturados, em que se garanta a homogeneidade da mistura ar-combustível na câmara para a avaliação da resposta do mecanismo a combustão e a formação de poluentes independente de parâmetros de injeção de combustível,
- Obtenção de dados experimentais referentes ao *spray* de combustível, visando uma melhor modelagem do processo de atomização e evaporação, para posterior aplicação em simulações com injeção direta de combustível,
- Obtenção de dados de emissões para mais espécies químicas,
- Teste do modelo de formação do filme líquido Bai-Gosman, para o qual é necessário unidades de processamento dos modelos numéricos com maior capacidade.
- Estudo e modelagem da difusividade mássica para misturas multicomponentes.



# REFERÊNCIAS

- ABIANEH, O. S.; OEHLSCHLAEGER, M. A.; SUNG, C.-J. A surrogate mixture and kinetic mechanism for emulating the evaporation and autoignition characteristics of gasoline fuel. *Combustion and Flame*, Elsevier, v. 162, n. 10, p. 3773–3784, 2015.
- AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO. *Combustíveis*. 2018.
- BAETA, J. G. C. *Metodologia experimental para a maximização do desempenho de um motor multicomcombustível turboalimentado sem prejuízo à eficiência energética global*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG, 2006.
- BAUMGARTEN, C. *Mixture formation in internal combustion engines*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2006.
- BENJAMIN, T. *Como o programa rota 2030 vai funcionar na prática e influenciar os carros vendidos no Brasil*. 2018. Disponível em: <<https://revistaautoesporte.globo.com/Noticias/noticia/2018/07/como-o-programa-rota-2030-vai-funcionar-na-pratica-e-influenciar-os-carros-vendidos-no-brasil.html>>.
- BERGMAN, T. L. et al. *Fundamentals of heat and mass transfer*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2011.
- BRAGA, R. M. *Avaliação da sensibilidade de mecanismos cinéticos químicos reduzidos para queima de etanol/gasolina na predição do fenômeno da detonação em um motor de combustão interna por simulações CFD 3D*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Minas Gerais- UFMG, 2018.
- BRAGA, R. M. et al. *3D numerical characterization of a multi-holes injector in a quiescent vessel and its application in a single-cylinder research engine using ethanol*. [S.l.], 2017.
- CHENG, W. K. et al. *An overview of hydrocarbon emissions mechanisms in spark-ignition engines*. [S.l.], 1993.
- COSTA, R. C.; SODRÉ, J. R. Hydrous ethanol vs. gasoline-ethanol blend: Engine performance and emissions. *Fuel*, Elsevier, v. 89, n. 2, p. 287–293, 2010.
- COTA, F. S. *Desenvolvimento de mecanismos cinéticos químicos reduzidos para diferentes misturas de Gasolina e Etanol*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG, 2018.
- DAI, W. et al. *Engine cycle simulation of ethanol and gasoline blends*. [S.l.], 2003.
- DALLMANN, T.; FAÇANHA, C. International comparison of brazilian regulatory standards for light-duty vehicle emissions. 2017.
- DELGADO, R. C.; ARAUJO, A. S.; FERNANDES, V. J. Properties of brazilian gasoline mixed with hydrated ethanol for flex-fuel technology. *Fuel Processing Technology*, Elsevier, v. 88, n. 4, p. 365–368, 2007.

- DEMESOUKAS, S. et al. Near wall combustion modeling in spark ignition engines. part b: Post-flame reactions. *Energy Conversion and Management*, Elsevier, v. 106, p. 1439–1449, 2015.
- FILHO, V. S. F. 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.
- GIACOSA, D. *Motori Endotermici*. [S.l.]: Hoepli Editore, 2000.
- HEYWOOD, J. B. *Internal Combustion Engine Fundamentals*. New York: Mcgraw-hill New York, 1988. ISBN 007028637X.
- HILL, P.; ZHANG, D. The effects of swirl and tumble on combustion in spark-ignition engines. *Progress in energy and combustion science*, Elsevier, v. 20, n. 5, p. 373–429, 1994.
- HINDI, G. de Q. *3D numerical investigation of mixture formation and combustion in a DISI engine at part-load under stratified operation*. Dissertação (Mestrado) — Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA, 2011.
- JOHNSON, T. Vehicular emissions in review. *SAE International Journal of Engines*, v. 9, n. 2, p. 2016–01–0919, 2016. ISSN 1946-3944. Disponível em: <<http://papers.sae.org/2016-01-0919/>>.
- JOSEPH, H. J. As fases passadas e futuras do proconve. *Anfavea. Seminário sobre Emissões de Veículos Diesel*, 2009.
- KAMPA, M.; CASTANAS, E. Human health effects of air pollution. *Environmental pollution*, Elsevier, v. 151, n. 2, p. 362–367, 2008.
- KOHSE-HÖINGHAUS, K. et al. Biofuel combustion chemistry: from ethanol to biodiesel. *Angewandte Chemie International Edition*, Wiley Online Library, v. 49, n. 21, p. 3572–3597, 2010.
- KONG, S.-C.; REITZ, R. D. Application of detailed chemistry and cfd for predicting direct injection hcci engine combustion and emissions. *Proceedings of the Combustion Institute*, Elsevier, v. 29, n. 1, p. 663–669, 2002.
- LEÃO, C.; GOULART, L. *O Inovar-Auto e os investimentos em P&D no setor automotivo*. [S.l.]: INVENTTA, 2012.
- LUMLEY, J. L. *Engines: an introduction*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1999.
- MAGHBOULI, A. et al. An advanced combustion model coupled with detailed chemical reaction mechanism for di diesel engine simulation. *Applied energy*, Elsevier, v. 111, p. 758–770, 2013.
- MARLAND G.; BODEN, T. et al. Global, regional, and national fossil fuel co2 emissions. *Trends: A compendium of data on global change*, p. 34–43, 2003.
- MASUM, B. M. et al. Effect of ethanol-gasoline blend on NOx emission in SI engine. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Elsevier, v. 24, p. 209–222, 2013. ISSN 13640321. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2013.03.046>>.

- MINC, C. I inventário nacional de emissões atmosféricas por veículos automotores rodoviários. Available in [http://www.mma.gov.br/estruturas/182/\\_arquivos/inventri\\_o\\_de\\_emisses\\_veiculares\\_182.pdf](http://www.mma.gov.br/estruturas/182/_arquivos/inventri_o_de_emisses_veiculares_182.pdf), 2013.
- NETTO, N. A. D. *Estudo experimental de tecnologias que visam a maximização da eficiência de conversão de combustível em um motor monocilindro de pesquisa*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Minas Gerais- UFMG, 2017.
- PETITJEAN D.; BERNARDINI, L. M. C. S. S. *Advanced gasoline engine turbocharging technology for fuel economy improvements*. [S.l.], 2004.
- PULKRABEK, W. W. *Engineering fundamentals of the internal combustion engine*. [S.l.: s.n.], 1997.
- REIS, L.M.; DOMINGOS, D.; CASTRO, F.; EXPEDITO, M.; MOLINA, R. Methodology for numerical simulations of a multi - hole injector with experimental validation. *Cimcco*, p. 1–8, 2016.
- REITZ, R. et al. Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays. *Atomisation and Spray Technology*, v. 3, n. 4, p. 309–337, 1987.
- RICHARDS K. J., S. P. K.; POMRANING, E. *CONVERGE v2.4 Manual*. [S.l.], 2007.
- 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*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG, 2017.
- SOARES, L. H. de B.; ALVES, B. J. R.; URQUIAGA, S.; BODDEY, R. M. Mitigação das emissões de gases efeito estufa pelo uso de etanol da cana-de-açúcar produzido no Brasil. *Circular técnica*, p. 14, 2009. Disponível em: <<http://www.cnpab.embrapa.br/publicacoes/download/cit027.pdf>>.
- SOUZA, A. Q. B. Gilmar Laigner de; MASSARANI, M. Residência tecnológica para engenheiros. *Simpósio Internacional de Engenharia Automotiva - SIMEA 2016*, 2016.
- TAN, J. Y. et al. Developments in computational fluid dynamics modelling of gasoline direct injection engine combustion and soot emission with chemical kinetic modelling. *Applied Thermal Engineering*, Elsevier, v. 107, p. 936–959, 2016.
- TAYLOR, G. The instability of liquid surfaces when accelerated in a direction perpendicular to their planes. i. In: THE ROYAL SOCIETY. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. [S.l.], 1950. v. 201, n. 1065, p. 192–196.
- TIBAQUIRÁ, J. E. et al. The effect of using ethanol-gasoline blends on the mechanical, energy and environmental performance of in-use vehicles. *Energies*, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 11, n. 1, p. 221, 2018.
- TURNER, D. et al. Combustion performance of bio-ethanol at various blend ratios in a gasoline direct injection engine. *Fuel*, Elsevier, v. 90, n. 5, p. 1999–2006, 2011.
- URNS, S. R. *Introdução à Combustão-: Conceitos e Aplicações*. [S.l.]: AMGH Editora, 2013.

- U.S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. *Criteria Air Pollutants*. 2017. Disponível em: <<https://www.epa.gov/environmental-topics/air-topics>>. Acessado em 07/06/2017.
- VAZ, F. A. Modelagem e simulação de chamas difusivas turbulentas de etanol. 2013.
- VAZ, M. G. J. *Validação de mecanismos cinéticos químicos reduzidos para mistura de gasolina-etanol em um motor de combustão interna*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Minas Gerais- UFMG, 2018.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. [S.l.]: Pearson Education, 2007.
- ZHAO, F.; LAI, M.-C.; HARRINGTON, D. L. *Automotive spark-ignited direct-injection gasoline engines*. [S.l.]: Elsevier, 1999. 437–562 p.

# Anexos

## ANEXO A – ENSAIOS EXPERIMENTAIS

Para este projeto, ensaios experimentais da combustão de diferentes misturas de gasolina e etanol foram realizadas no CTM-UFGM em um motor monocilíndrico de pesquisa (SCRE). Utilizou-se como combustíveis misturas de Etanol Anidro com Gasolina Padrão L6 (E10, E22, E27, E50, E85), Etanol Hidratado (E100) e Gasolina Padrão L6 (E0), para os quais utilizou-se um sistema de injeção direta de combustível.

Dados referentes ao desempenho do motor foram obtidos pelos sistemas: ETU, PUMA, INDICOM e NAPRO. O sistema PUMA faz a aquisição e monitoramento dos dados do dinamômetro, tais como: temperatura dos fluidos do motor e em regiões de interesse, vazões de ar e combustível, razão de equivalência ar-combustível, pressões nas regiões de interesse, o consumo específico de combustível e sua eficiência de conversão. O sistema INDICOM é responsável pela aquisição e monitoramento da pressão dentro do cilindro e nos coletores de admissão e escapamento. Parâmetros da combustão também são calculados por esse sistema, tais como: MBF50, MBF10-90, MBF10-50, MBF50-90, início da combustão (SOC) e covariância das pressões (COV-NIMEP e COV-PMAX). Além disso, é controlado por esse sistema a injeção de combustível e o avanço de ignição. Estes, por sua vez, são ajustados pela unidade eletrônica ETU pela qual se gerencia o momento da ignição da mistura ar-combustível, o momento em que se inicia a injeção de combustível, o tempo de injeção de combustível e a pressão da linha de injeção direta.

O sistema NAPRO mede no coletor de exaustão, os poluentes gasosos: CO, CO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub> e HC pelo método de medição por infravermelho não dispersivo (NDIR), o qual detecta a absorção de comprimentos de onda infravermelha característicos das espécies analisadas. Para as medições de HC, esse equipamento mede equivalentes de hexanos (C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>). Em cada ensaio experimental, este sistema adquiriu os dados de emissões por 60 segundos. Os ensaios experimentais foram realizados em condições ambientais uniformes, mantendo-se as temperaturas de água, óleo e combustível uniformes. Foram medidos 200 ciclos de operação do motor. A Tabela A.1 mostra quais foram os dados experimentais fornecidos com sua forma de cálculo ou medição.

Tabela A.1 – Dados obtidos nos ensaios experimentais

Grandeza	Descrição	Fonte
NIMEP [bar]	Pressão média efetiva indicada líquida	Calculado nível II
COV-NIMEP [%]	Covariância da pressão média efetiva indicada líquida	Calculado nível I
PMEP [bar]	Pressão média efetiva de bombeamento (Pumping)	Calculado nível II
BMEP [bar]	Pressão média efetiva de eixo (Brake)	Calculado nível II
FMEP [bar]	Pressão média efetiva de atrito (Friction)	Calculado nível II
Regime de rotação [rpm]	Regime de rotação do motor durante o ensaio	Medido
Eficiência de Conversão de Combustível [%]	Eficiência de conversão de combustível indicada	Calculado nível II
ISFC [g/kwh]	Consumo específico de combustível indicado	Calculado nível I
Lambda	Relação ar/combustível normalizada (1,00 = estequiométrico)	Medido
MBF50 [°]	Ângulo o qual se tem 50% da fração de massa queimada	Calculado nível III
MBF10-90 [°]	Duração, em graus, o qual se tem de 10 a 90% da fração de massa queimada	Calculado nível III
MBF10-50 [°]	Duração, em graus, o qual se tem de 10 a 50% da fração de massa queimada	Calculado nível III
MBF50-90 [°]	Duração, em graus, o qual se tem de 50 a 90% da fração de massa queimada	Calculado nível III
Avanço de ignição [°]	Ângulo antes do PMS de compressão no qual ocorre a ignição	Medido
SOC [°]	Ângulo no qual ocorre o início da combustão	Calculado nível III
Ignition Delay [°]	Duração, em graus, entre a ignição e o início da combustão	Calculado nível I
Pressão máxima no cilindro [bar]	Máxima pressão atingida dentro de cilindro	Medido
Ângulo da pressão máxima [°]	Ângulo o qual ocorre a pressão máxima no cilindro após o PMS	Medido
COV-Pressão máxima [%]	Covariância da pressão máxima	Calculado nível I

Vol CO [%]	Quantidade em volume (seco) de CO nos gases da exaustão	Medido
Vol nox [ppm]	Quantidade em volume (seco) de nox nos gases de exaustão	Medido
Vol CO2 [%]	Quantidade em volume (seco) de CO2 nos gases da exaustão	Medido
Vol HC [ppm]	Quantidade em volume (seco) de HC nos gases de exaustão	Medido

DOI [°]	Duração da injeção de combustível em graus	Medido
SOI [°]	Ângulo em que ocorre o início da injeção de combustível	Medido
IVO - APMS [°]	Ângulo de abertura da válvula de admissão antes do PMS	Medido
IVC - DPMS [°]	Ângulo de fechamento da válvula de admissão depois do PMI	Medido
EVO - APMI [°]	Ângulo de abertura da válvula de exaustão antes do PMI	Medido
EVC - DPMS [°]	Ângulo de fechamento da válvula de exaustão depois do PMS	Medido
Pressão de injeção [bar]	Pressão de injeção na linha de combustível	Medido
Tempo de injeção [ms]	Duração da injeção do combustível	Calculado nível I
Vazão mássica de combustível [kg/h]	Quantidade de massa de combustível em relação ao tempo	Medido
Vazão mássica de ar [kg/h]	Quantidade de massa de ar em relação ao tempo	Medido
Vazão média de injeção [g/s]	Vazão média de combustível durante o intervalo de injeção	Calculado nível I
Massa de combustível por ciclo [mg]	Quantidade de massa de combustível injetada por ciclo	Calculado nível I








Umidade relativa [%]	Umidade relativa do ambiente (sala de ensaios)	Medido
Pressão barométrica [bar]	Pressão atmosférica do ambiente	Medido
Pressão na admissão [bar]	Pressão no coletor de admissão	Medido
Temperatura na admissão [°C]	Temperatura no coletor de admissão	Medido
Pressão no escapamento [bar]	Pressão no coletor de exaustão	Medido
Temperatura escapamento [°C]	Temperatura no coletor de exaustão	Medido

Potência [kw]	Potência de eixo	Medido
Potência corrigida [kw]	Potência corrigida em função das condições ambientais da sala - ABNT 1585	Calculado nível I
Potência indicada [kw]	Potência indicada	Calculado nível I



Torque [Nm]	Torque de eixo	Medido
Torque corrigido [Nm]	Torque corrigido em função das condições ambientais da sala - ABNT 1585	Calculado nível I
Torque indicado [Nm]	Torque indicado	Calculado nível I

Temperatura da água de arrefecimento [°C]	Temperatura do líquido de arrefecimento	Medido
Temperatura do óleo lubrificante [°C]	Temperatura do óleo lubrificante do motor	Medido
Temperatura do combustível [°C]	Temperatura do combustível na linha de fornecimento	Medido

Legenda de cores	
	Parâmetros de interesse para reconhecimento das condições da prova
	Parâmetros correlacionados ao processo de combustão e indicativos do uso de tecnologia avançada (EGR e flowbox)
	Parâmetros referentes à emissão de gases poluentes
	Parâmetros correlacionados ao processo de formação da mistura ar-combustível
	Parâmetros referentes às condições de fronteira/ambientais do ensaio
	Parâmetros com referência ao regime de carga do motor
	Parâmetros referentes às temperaturas dos fluidos utilizados no motor mantidos constantes nos ensaios
Descrição da fonte	
Medido	Parâmetro medido por sensores. Sistema PUMA, INDICOM, NAPRO
Calculado nível I	Parâmetro calculado a partir de matemática simples. Ex. Parâmetros estatísticos, valores corrigidos, cálculo com base em parâmetros da tabela
Calculado nível II	Parâmetro calculado a partir de modelo matemático simplificado. Ex. (I-P-F-B) MEP
Calculado nível III	Parâmetro calculado a partir de modelo matemático complexo. Ex. (X)MBF

## ANEXO B – TESTE DOS COEFICIENTES DE DIFUSIVIDADE MÁSSICA

Ao longo do desenvolvimento deste trabalho, surgiu a necessidade de se testar os coeficientes de difusividade mássica a fim de se obter uma melhor formação de mistura dentro do cilindro nos modelos computacionais. Este teste foi com o combustível E27 (27% de volume de etanol na mistura) em diferentes rotações e cargas. A composição mássica desse combustível está na Tabela 29.

Tabela 29 – Composição mássica E27

Espécies	F.Molecular	Fração mássica
n-Heptano	C7H16	0,077425695
Isoctano	C8H18	0,182244691
Tolueno	C6H5CH3	0,317753806
Etanol	C2H5OH	0,297526268
Hepteno	C7H14	0,12504954
Total	-	1

Fonte: (COTA, 2018)

Mantendo-se essa composição constante, simulações computacionais foram feitas utilizando diferentes coeficientes  $D_0$  e  $n_0$  disponíveis no CONVERGE. Com base em uma média ponderada dos coeficientes individuais das espécies e frações mássicas, calculou-se também coeficientes médios para o combustível E27. No programa consta também coeficientes para gasolina, cuja composição e frações mássicas são: 50% isoctano, 35% decano, 10% pentano e 5% dodecano. Na Tabela 30 estão os coeficientes utilizados neste teste.

Tabela 30 – Coeficientes de difusividade

Espécies	$D_0$	$n_0$
Isoctano	5,44e-06	1,60
Gasolina Converge	7,90e-06	1,87
Etanol	1,05e-05	1,77
Gasolina - Calculada	7,57e-06	1,74

Na Tabela 31 estão resumidas as rotações de cargas que foram estudadas nesses testes:

Tabela 31 – Simulações computacionais do motor monocilíndrico de pesquisa

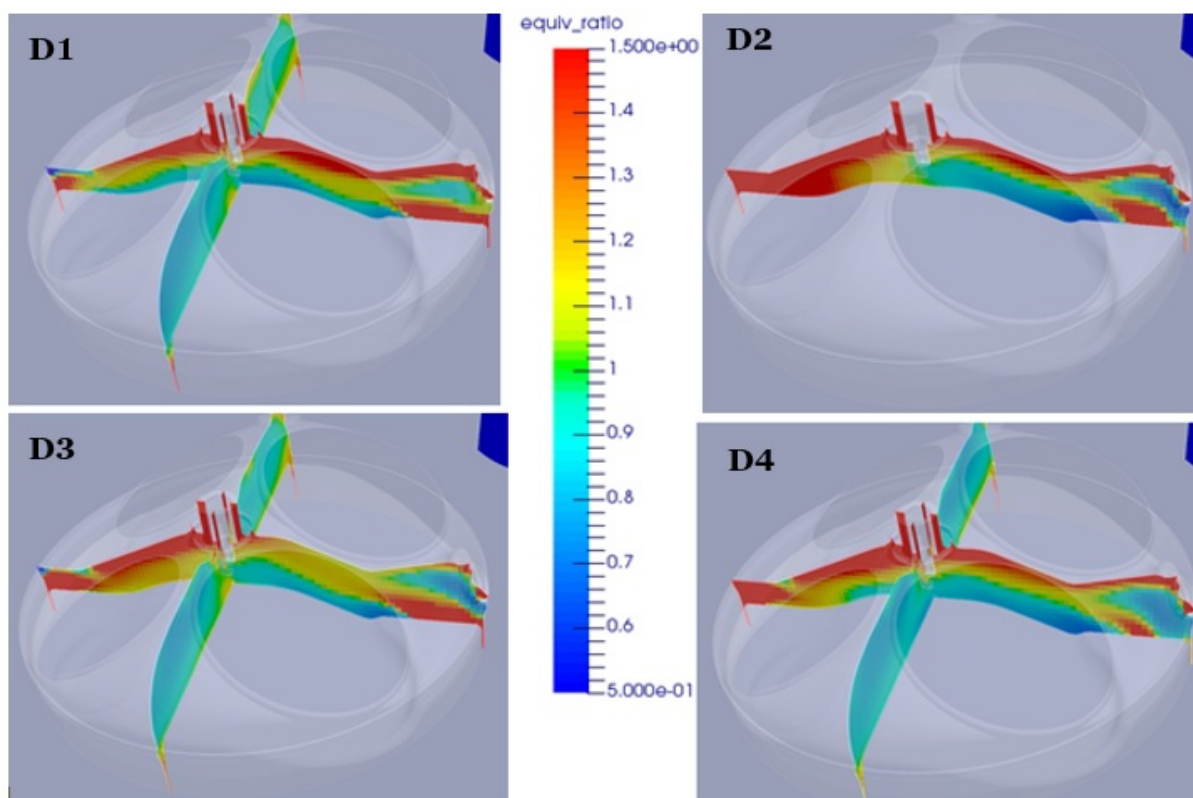
	Velocidade de rotação [rpm]	BMEP [bar]
D1_Gasolina-Calc		
D2_Isoctano		
D3_Etanol	2000	4
D4_Gasolina-Converge		
D5_Gasolina-Calc		
D6_Isoctano	2000	8
D7_Gasolina-Converge		
D8_Etanol		
D9_Gasolina-Converge		
D10_Gasolina-Calc	3500	8
D11_Etanol		
D12_Isoctano		

## B.1 Resultados

### B.1.0.1 Casos D1-D4: E27, 2000 rpm e 4Bmep

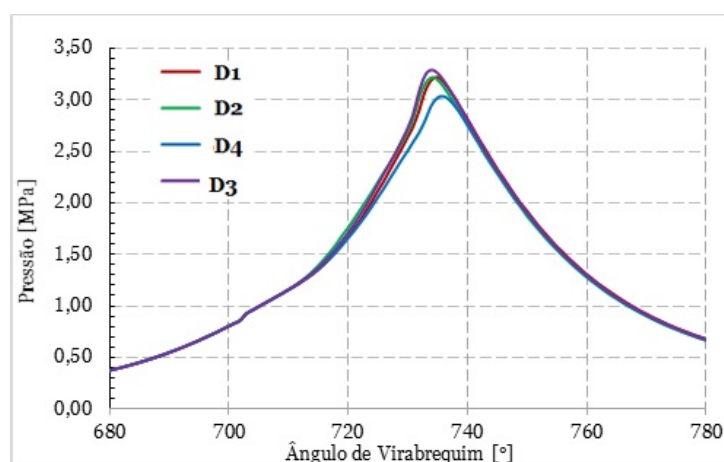
A Figura 49 apresenta uma comparação para  $\phi$  local para 1 grau do eixo virabrequim antes da ignição da mistura ar-combustível. Observa-se nessa figura, expressiva variação na distribuição de combustível ao longo da câmara de combustão para cada caso simulado e em todos eles a mistura ar-combustível apresentou estratificação.

Figura 49 – Casos D1-D4



Comparando-se as pressões no cilindro, mostradas na Figura 50, as curvas de pressão apresentam comportamentos diferentes. A maior pressão é obtida para D3 em que são usados os coeficientes para o etanol. O menor pico de pressão foi obtido para D4, que corresponde aos coeficientes recomendados pelo programa para a gasolina.

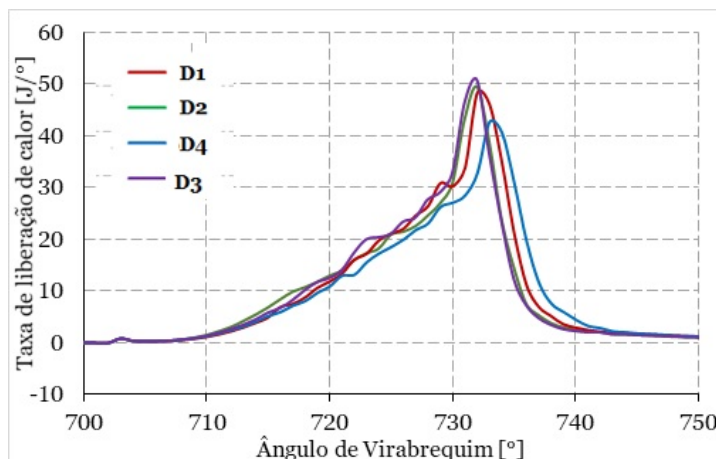
Figura 50 – Comparação da pressão no cilindro



Acompanhando as curvas de pressão, observa-se na Figura 51, que D4 apresentou um maior tempo de queima da mistura e menor pico de liberação de liberação de calor que as outras simulações numéricas. O etanol apresentou a maior taxa de liberação assim

como a combustão mais rápida. Na Figura 49, D3 apresentou menor região com excesso de combustível, o que explica os melhores resultados alcançados.

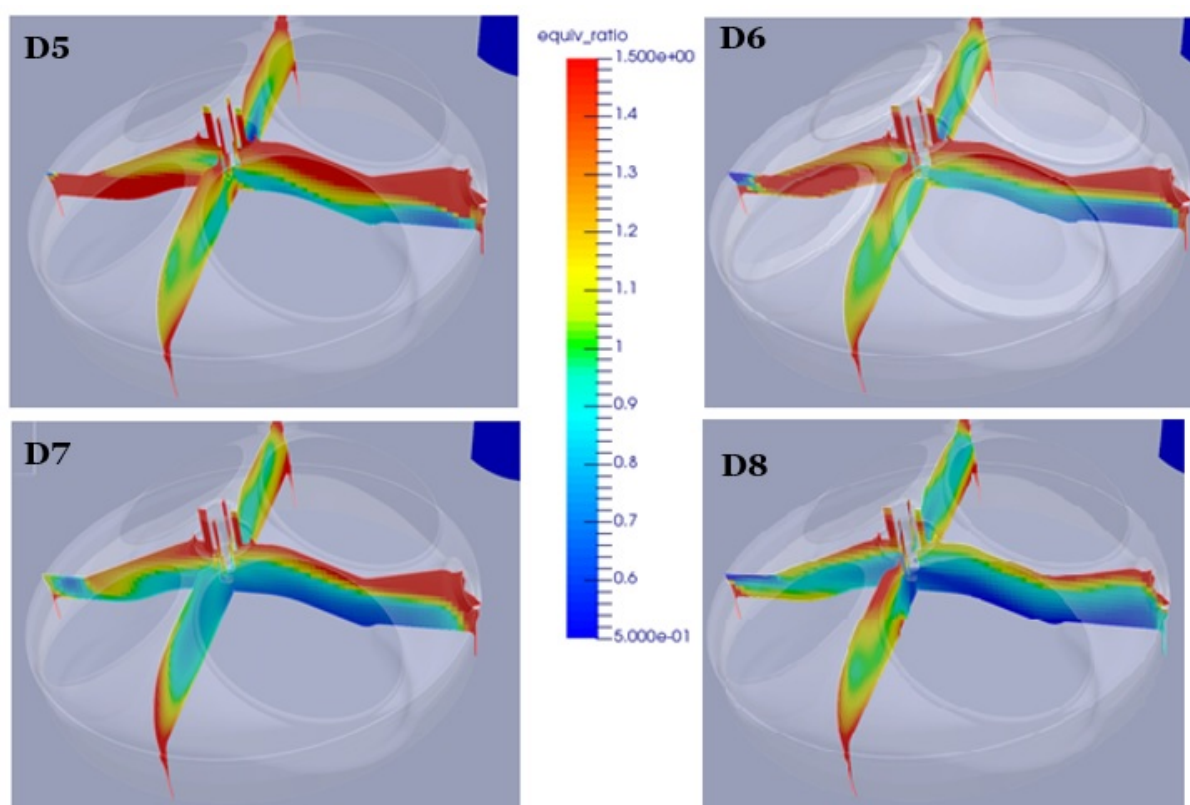
Figura 51 – Taxa de liberação de calor



#### B.1.0.2 Casos D5-D8: E27, 2000 rpm e 8 Bmep

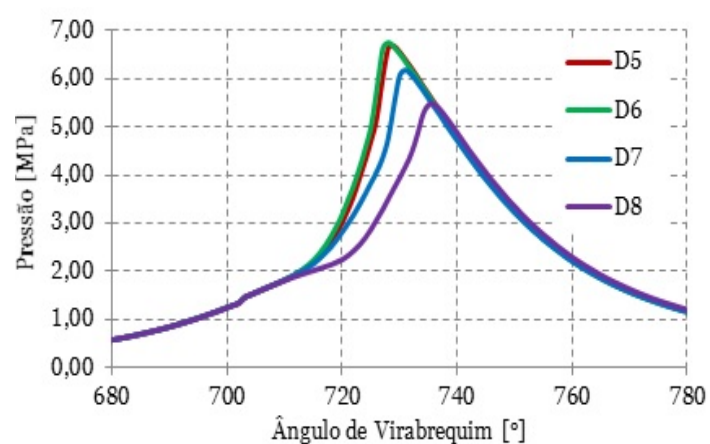
Os gráficos e curvas a seguir apresentam os resultados obtidos para as simulações com as condições de operação 2000 rpm e 8 Bmep. Para este grupo de simulações, as diferenças nos resultados foram ainda mais evidentes, pois maior quantidade de combustível foi injetado no cilindro para se atingir a pressão de 8 Bmep. A Figura 52 apresenta imagens de  $\phi$  local. Com os coeficientes de difusividade mássica do etanol, não foram formadas regiões grandes com concentração de combustível. Diferentemente dos casos anteriores, com a difusividade calculada para a gasolina obteve-se o pior resultado na formação de mistura.

Figura 52 – Casos D5-D8



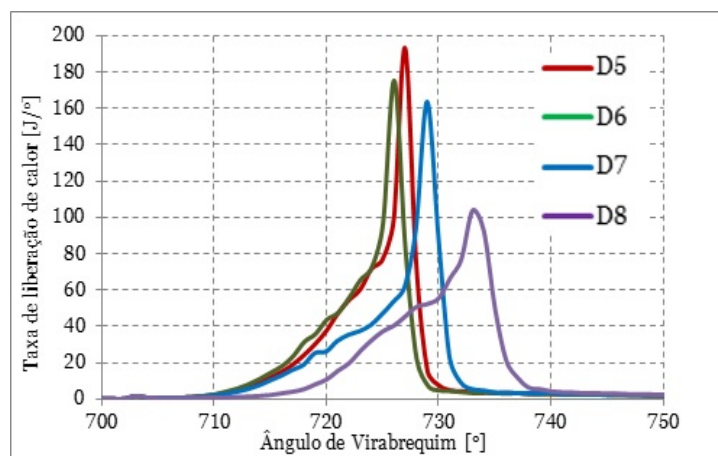
As curvas de pressão no cilindro, que são mostradas na Figura 53, mostram que para os casos D5 e D6 o mesmo comportamento foi obtido em relação a pressão. Nessas simulações as maiores pressões foram obtidas para os casos com coeficientes de difusividade menores.

Figura 53 – Pressão no cilindro D5-D8



Essa inversão em relação aos casos D1-D4 também é vista na liberação de calor, em que a maior duração da queima foi para o D8. A Figura 54, apresenta as curvas de taxa de liberação de calor.

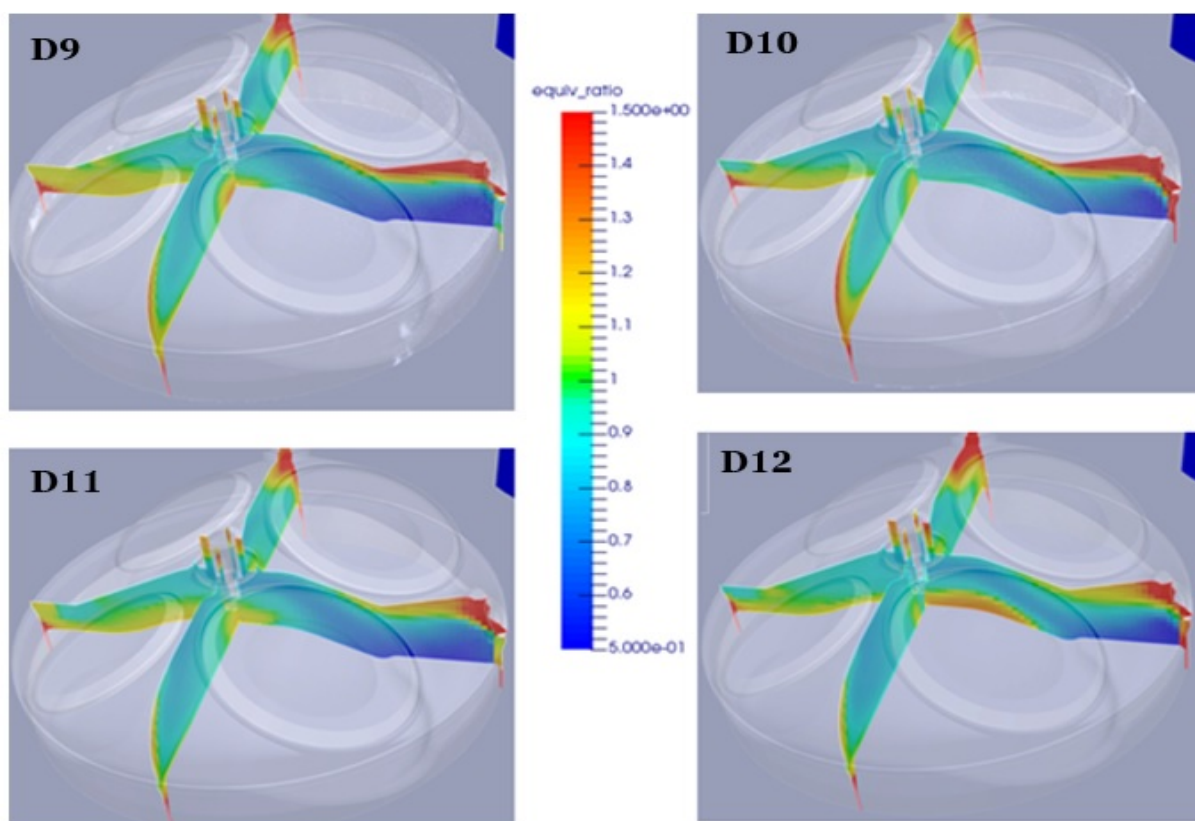
Figura 54 – Taxa de liberação de calor D5-D8



### B.1.0.3 Casos D9-D12: E27, 3500 rpm e 8 Bmep

Aumentando-se a rotação para 3500 rpm, foram obtidas as misturas mostradas na Figura 55. Para essa rotação mais elevada, a formação de regiões extremamente ricas em combustível foi menor em comparação com o observado nos casos anteriores. Comparando-se as imagens, a razão de equivalência local não se difere muito entre elas.

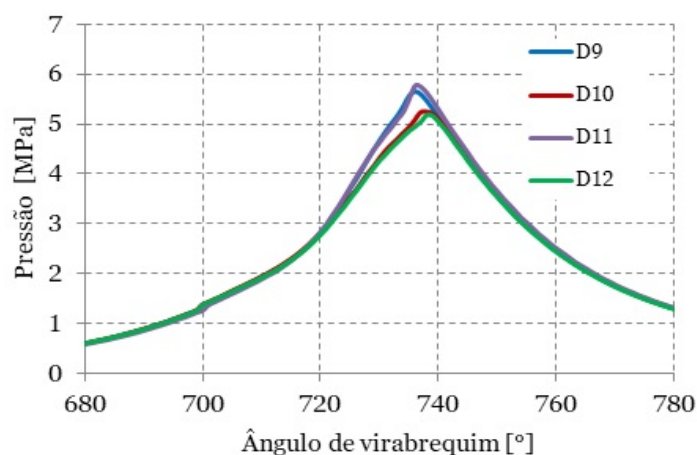
Figura 55 – Casos D9-D12



A Figura 56, apresenta o comportamento da pressão no cilindro. Em relação aos outros casos, as curvas de pressão apresentam comportamentos próximos. Os picos maiores

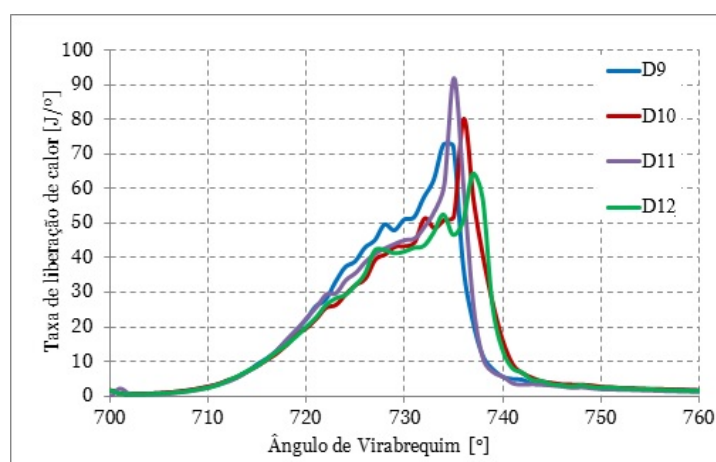
de pressão foram obtidos para os casos com coeficientes de difusividade do etanol (D11) e da gasolina padrão do programa (D9). Sendo os menores coeficientes para o isoctano (D10) e os que foram calculados (D12), ainda sim, a difusividade influenciou nos resultados.

Figura 56 – Pressão no cilindro D9-D12



Na taxa de liberação de calor, Figura 57, o comportamento foi semelhante ao visto nas curvas de pressão. Comparando-se esses resultados com a Tabela 30, a medida que o coeficiente  $D_0$  aumenta o pico de liberação de calor é maior e o processo da combustão tem menor duração.

Figura 57 – Taxa de liberação de calor D9-D12



Com o teste, verificou-se que a difusividade mássica tem grande influência sobre a formação de mistura principalmente para velocidades de rotação relativamente baixas. Ainda que seja possível ver sua influência para rotações mais altas, a formação da mistura passa a depender mais do transporte das espécies pelo movimento da carga dentro do cilindro. Com base nisso e sendo a formação de mistura importante para a análise das emissões de poluentes, selecionou-se para este trabalho dos dados disponibilizados pela



equipe experimental do CTM-UFMG correspondente a rotações de 3000 rpm, visando obter misturas ar-combustíveis que gerem resultados satisfatórios.