



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

VALIDAÇÃO DE MECANISMOS CINÉTICOS QUÍMICOS
REDUZIDOS PARA MISTURA DE GASOLINA-ETANOL
EM UM MOTOR DE COMBUSTÃO INTERNA

AUTORA: MARILIA GABRIELA JUSTINO VAZ

Belo Horizonte, 30 de julho de 2018

Marília Gabriela Justino Vaz

**VALIDAÇÃO DE MECANISMOS CINÉTICOS QUÍMICOS
REDUZIDOS PARA MISTURA DE GASOLINA-ETANOL
EM UM MOTOR DE COMBUSTÃO INTERNA**

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

Área de concentração: Energia e Sustentabilidade

Orientador: Prof. Dr. Rudolf Huebner

Co orientador: Dr. Gustavo de Queiroz Hindi

Belo Horizonte

Escola de Engenharia da UFMG

2018

V393v

Vaz, Marília Gabriela Justino.

Validação de mecanismos cinéticos químicos reduzidos para mistura de gasolina-etanol em um motor de combustão interna [manuscrito] / Marília Gabriela Justino Vaz. – 2018.

208 f., enc.: il.

Orientador: Rudolf Huebner.

Coorientador: Gustavo de Queiroz Hindi.

Dissertação (mestrado) Universidade Federal de Minas Gerais, Escola de Engenharia.

Anexos: f. 193-208.

Bibliografia: f. 185-192.

1. Engenharia mecânica - Teses. 2. Motores de combustão interna - Teses. 3. Alcool - Teses. 4. Gasolina - Teses. 5. Dinâmica dos fluidos - Teses. I. Huebner, Rudolf. II. Hindi, Gustavo de Queiroz. III. Universidade Federal de Minas Gerais. Escola de Engenharia. IV. Título.

CDU: 621(043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA**

Av. Antônio Carlos, 6627 - Campus Universitário

31270-901 - Belo Horizonte - MG

Tel.: +55 31 3409.5145

E-mail: cpgmec@demec.ufmg.br

ESCOLHA DO MEMBRO DA BANCA EXAMINADORA PARA SUPERVISIONAR AS CORREÇÕES SUGERIDAS E/OU REQUERIDAS

A Banca Examinadora constituída pelos professores Rudolf Huebner - Orientador, Gustavo de Queiroz Hindi - Coorientador - Alten Sverige AB - ALTEN SVG - Suécia, Jose Guilherme Coelho Baeta/Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG, Ramon Molina Valle/Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG, reunida no dia 30 de julho de 2018, às 14:00 horas, para examinar a dissertação intitulada "VALIDAÇÃO DE MECANISMOS CINÉTICOS QUÍMICOS REDUZIDOS PARA MISTURA DE GASOLINA-ETANOL EM UM MOTOR DE COMBUSTÃO INTERNA", defendida pela aluna Marília Gabriela Justino Vaz, decidiu, por unanimidade, designar o Prof. Rudolf Huebner, para supervisionar as correções requeridas e/ou sugeridas pela Banca Examinadora da candidata.

A Banca Examinadora decidiu ainda que a candidata tem um prazo de 60 dias para a entrega da versão final de sua dissertação.

Belo Horizonte, 30 de julho de 2018.

Prof. Rudolf Huebner

Orientador - Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG

Dr. Gustavo de Queiroz Hindi

Coorientador - Alten Sverige AB - ALTEN SVG - Suécia

Prof. Jose Guilherme Coelho Baeta

Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG

Prof. Ramon Molina Valle

Departamento de Engenharia Mecânica/ UFMG

AGRADECIMENTOS

Existem pessoas capazes de transformar o mundo ao seu redor e fazer a diferença. Não sei se foi sorte ou destino, mas tive a oportunidade de conhecer duas em especial no meu caminho. A primeira que encontrei foi o meu padraсто Ataíde Martins, que mesmo não estando mais fisicamente, me animava nos “probleminhas” que surgiam durante grande parte do desenvolvimento desse trabalho. A isso, e a todos os outros anos sempre ao meu lado, me incentivando e me educando, mesmo em memória, terão meus eternos agradecimentos.

A segunda pessoa que fez uma diferença na minha caminhada foi o professor Ramon Molina Valle, que em 2013 me deu a oportunidade de trabalhar no CTM, mesmo sendo aluna da metalurgia e não conhecia na época nada de motores. A todos esses anos de incentivos e oportunidades, na qual sem elas não estaria terminado essa etapa, ficam meu grande obrigado.

Agradeço também a minha mãe Oracilia, ao Michael, a Jô e o Ramon pelo carinho e motivação. A família é a base de tudo.

Ao meu orientador Rudolf Huebner, pelo auxílio na elaboração desta dissertação e pelos ensinamentos durante o mestrado.

Ao meu co-orientador Gustavo Hindi, pelo suporte na organização desse projeto e também pelas “aulas” de GT-Power e CFD que aumentaram significamente os meus conhecimentos em simulação de motores.

Aos meus amigos queridos Bulas e Leonardo, por todas as “resenhas”. Que a nossa amizade continue, mesmo nos diferentes rumos que a vida nos leve.

Aos meus amigos e colegas de trabalho Raphael, Clarissa, Filipe que contribuíram muito pelas discussões técnicas, como também não tão sérias. E aos demais amigos do CTM, que mesmo não citados aqui contribuíram diretamente ou mesmo que indiretamente com seu companheirismo.

A FCA por todo auxílio financeiro e por sua posição inovadora ao criar o Programa de Residência Tecnologia para Engenheiros, programa que possibilitou a realização desse trabalho. E a Lawrence Livermore National Security pelas licenças do CONVERGE.

Meus sinceros agradecimentos.

RESUMO

As exigências e regulamentações cada vez mais rigorosas em relação ao consumo, eficiência e principalmente emissões de veículos reforçam a necessidade de otimizar os motores de combustão interna. Em vista de um melhor entendimento do processo de combustão, este trabalho investiga através de simulações numéricas o comportamento de dois mecanismos cinéticos químicos reduzidos da mistura de gasolina-etanol em um motor monocilindro de pesquisa com injeção direta e carga homogênea. Esses dois mecanismos possuem respectivamente 75 espécies e 343 reações; e 115 espécies e 639 reações e são avaliados em relação ao tamanho do mecanismo químico cinético, a reprodução do fenômeno de combustão e a viabilidade computacional da simulação numérica. A metodologia abordada consiste na reprodução de resultados de ensaios experimentais para a validação das simulações tridimensionais usando o programa Converge CFD para a avaliação dos mecanismos cinéticos químicos. Para o modelo tridimensional foram utilizadas condições de contorno experimentais e condições de contorno obtidas à partir de simulações numéricas unidimensionais no programa GT-Power. Os resultados foram divididos em duas etapas. Na primeira, comparou-se o comportamento dos dois mecanismos reduzidos com um mecanismo cinético químico da literatura e com os dados experimentais para o E10 na de rotação de 3000 rpm e carga de 6 BMEP. O mecanismo de 75 espécies e 343 reações apresentou os melhores resultados para a reprodução da combustão. Na segunda etapa, foi avaliado o comportamento do mecanismo 75 espécies e 343 reações, analisado seu desempenho para a reprodução da combustão de misturas de gasolina-etanol em diferentes concentrações (E27, E50, E85, E100), na mesma condição de rotação e carga (3000 rpm e 6 BMEP).

PALAVRAS CHAVES: *Motores de combustão interna, Mecanismos Cinéticos Químicos Reduzidos, Etanol, Gasolina, Dinâmica dos Fluidos Computacional.*

ABSTRACT

The demands and regimentation on fuel consumption, efficiency and especially on vehicle emissions have been becoming increasingly stringent, reinforcing the need to optimize internal combustion engines. Aiming a better understanding of the combustion process, this work investigates, through numerical simulation, the behavior of two reduced chemical kinetic mechanisms of the gasoline-ethanol blends in a single-cylinder engine with direct injection and homogenous charge. These two mechanisms have, respectively, 75 species and 343 reactions; 115 species and 639 reactions. They are evaluated in relation to the size of the kinetic chemical mechanism, the reproduction of the combustion phenomenon and the computational feasibility of the numerical simulation. The methodology is based on the reproduction of results of experimental tests for the validation of three-dimensional simulations using the Converge CFD software for the evaluation of chemical kinetic mechanisms. For the three-dimensional model were used boundary conditions obtained from experimental tests and also from one-dimensional numerical simulations by GT-Power software. The results are divided in two main parts. In the first part, the behavior of these two reduced mechanisms is compared with a chemical kinetic mechanism from the literature and with the experimental data for the E10 in the rotation of 3000 rpm and load of 6 BMEP. The mechanism of 75 species and 343 reactions presents the best results for the reproduction of the combustion. In the second part, the behavior of the engine 75 species and 343 reactions is evaluated, and its performance is analyzed for the reproduction of gasoline-ethanol blends in different concentrations (E27, E50, E85, E100) in the same rotation and load conditions (3000 rpm and 6 BMEP).

KEYWORDS: *Internal Combustion Engines Reduced Chemical Kinetics Models, Gasoline, Ethanol, Computational Fluid Dynamics*

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1.1- CONSUMO MUNDIAL DE ENERGIA POR COMBUSTÍVEL. FONTE: RETIRADO DE (BP ENERGY OUTLOOK , 2017)	21
FIGURA 1.2 - COMPARATIVO DO GRUPO MOTOPROPULSOR E CONSUMO PARA VEÍCULOS LEVES EM 2015. FONTE: RETIRADO DE (OECD, ET AL., 2017).....	23
FIGURA 3.1 - REPRESENTAÇÃO DO CICLO IDEAL PARA MOTORES OTTO: (A) DIAGRAMA PV E (B) DIAGRAMA TS. FONTE: ADAPTADO DE (PULKRABEK, 1997).....	28
FIGURA 3.2 - QUATRO TEMPOS DE UM MOTOR DE IGNIÇÃO POR CENTELHA. FONTE: ADAPTADO DE (FERGUSON, ET AL., 2016).....	29
FIGURA 3.3 - REPRESENTAÇÃO DO CICLO REAL OU INDICADO. FONTE: ADAPTADO DE (ÇENGEL, ET AL., 2004).....	31
FIGURA 3.4 – COMPARAÇÃO ENTRE O CICLO TEÓRICO E REAL OTTO. FONTE: ADAPTADO DE (GIACOSA, 1970).....	32
FIGURA 3.5 – RAZÃO VOLUMÉTRICA DE COMPRESSÃO: À ESQUERDA, O PISTÃO ESTÁ NO PMS, REPRESENTANDO O VOLUME MORTO (V_c), E, À DIREITA, O PISTÃO ESTÁ NO PMI, REPRESENTANDO O VOLUME TOTAL. FONTE: RETIRADO DE (BAETA, 2006).....	33
FIGURA 3.6 – CURVA TÍPICA DA FRAÇÃO DE MASSA QUEIMADA. FONTE: ADAPTADO DE (HEYWOOD, 1988)	35
FIGURA 3.7 - CICLO DE VIDA DA PRODUÇÃO DE ETANOL, O DIÓXIDO DE CARBONO EMITIDO DA QUEIMA DE ETANOL É CONSUMIDO ATRAVÉS DA FOTOSÍNTESE DA CANA-DE-AÇÚCAR. FONTE: ADAPTADO DE (LOPES, ET AL., 2016).....	41
FIGURA 3.8 – SISTEMAS DE INJEÇÃO DE COMBUSTÍVEL. FONTE: ADAPTADO DE (ZHAO, ET AL., 1999).....	45
FIGURA 3.9 - TIPOS DE INJETORES E O EFEITO DA PRESSÃO SOBRE A ESTRUTURA DO SPRAY. FONTE: ADAPTADO DE (ZHAO, ET AL., 1999)	46
FIGURA 3.11 - ESQUEMA DA MANEIRA QUE O PISTÃO GERA <i>SQUISH</i> (A) CÂMARA DE COMBUSTÃO EM CUNHA E PISTÃO RETO; (B) CÂMARA RETA COM O PISTÃO COM <i>BOWL</i> . FONTE: ADAPTADO DE (HEYWOOD, 1988).....	48
FIGURA 3.12 - TIPOS DE OPERAÇÃO: CARGA HOMOGÊNEA E CARGA ESTRATIFICADA. FONTE: ADAPTADO DE (ÇELIK, ET AL., 2010)	50
FIGURA 3.13 - SISTEMAS DE PREPARAÇÃO DA MISTURA ESTRATIFICADA PARA DI: (A) DIRECIONADO A VELA – SPRAY GUIDED; (B) DIRECIONADO A PAREDE – WALL GUIDED; (C) ARRASTADO POR AR – AIR GUIDED. FONTE: ADAPTADO DE (ÇELIK, ET AL., 2010).	51
FIGURA 3.14 – GEOMETRIA DA COROA DO PISTÃO E MOVIMENTAÇÃO DE CARGA NO CILINDRO PARA O <i>AIR GUIDED</i> . FONTE: ADAPTADO DE (BAUMGARTEN, 2006).	53
FIGURA 3.15 – FASES DA COMBUSTÃO. FONTE: ADAPTADO DE (FERRARI, 2000)	55
FIGURA 3.16 - PROPAGAÇÃO DA FRENTE DE CHAMA. FONTE: ADAPTADO DE (FERRARI, 2000)	56
FIGURA 3.17 – CURVAS DE PRESSÃO NO CILINDRO COM E SEM DETONAÇÃO. FONTE: ADAPTADO DE (FERGUSON, ET AL., 2016).....	58
FIGURA 3.18 – PRINCIPAIS CAMINHOS PARA A OXIDAÇÃO DO ETANOL. FONTE: RETIRADO DE (LEPLAT, ET AL., 2010).....	62
FIGURA 3.19 - ESQUEMA DA ABORDAGEM DE GRADE ESCALONADA: GRANDEZAS ESCALARES CALCULADAS EM CENTROIDE, GRANDEZAS VETORES NOS LIMITES. FONTE: ADAPTADO DE (GAMA TECHNOLOGIES, 2016).....	68
FIGURA 3.20 – REPRESENTAÇÃO DO VOLUME FINITO. FONTE: RETIRADO DE (VERSTEEG, ET AL., 2007).....	76
FIGURA 3.21 - SUBPROCESSOS PARA A MODELAGEM TRIDIMENSIONAL DE MOTORES DE IGNIÇÃO POR CENTELHA. FONTE: AUTOR	77
FIGURA 3.22 – VALOR MÉDIO E COMPONENTE FLUTUANTE DA VELOCIDADE EM UM ESCOAMENTO TURBULENTO. FONTE: ADAPTADO DE (VERSTEEG, ET AL., 2007)	80

FIGURA 3.23 – COMPARAÇÃO DA PROPORÇÃO MODELADA E CALCULADA ENTRE O DNS, LES E RANS. FONTE: ADAPTADO DE (SODJA, 2007).....	80
FIGURA 3.24 – FENÔMENOS EXISTENTES NA ATOMIZAÇÃO DO COMBUSTÍVEL. FONTE: ADAPTADO DE (BAUMGARTEN, 2006).....	84
FIGURA 3.25 – QUEBRA PRIMÁRIA PELO MÉTODO DE <i>BLOB</i> . FONTE: ADAPTADO DE (BAUMGARTEN, 2006)	85
FIGURA 3.26 - INSTABILIDADE DE KELVIN-HELMHOLTZ. FONTE: RETIRADO DE (BAUMGARTEN, 2006)	86
FIGURA 3.27 – INSTABILIDADE DE RAYLEIGH-TAYLOR NA GOTA. FONTE: ADAPTADO DE (BAUMGARTEN, 2006).....	88
FIGURA 3.28 – COMPRIMENTO DE QUEBRA PARA A ATUAÇÃO DO KH-RT. FONTE: RETIRADO DE (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017)	89
FIGURA 3.29 – DEFORMAÇÃO SOFRIDA PELA GOTA. FONTE: RETIRADO DE (BAUMGARTEN, 2006)	90
FIGURA 3.30 - ESQUEMA DA FORMAÇÃO DO FILME LÍQUIDO. FONTE: ADAPTADO DE (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017).....	94
FIGURA 3.31 - INTERAÇÃO GOTA-PAREDE. FONTE: RETIRADO DE (BAUMGARTEN, 2006)	95
FIGURA 3.32 – VIABILIDADE EM FUNÇÃO DA COMPLEXIDADE DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE COMBUSTÃO. FONTE: ADAPTADO DE (CANCINO, 2009)	102
FIGURA 4.1 - ESQUEMA GERAL DA METODOLOGIA DE TRABALHO. FONTE: AUTOR	112
FIGURA 4.2 – IMAGEM DO SCRE. FONTE: CTM-UFMG	114
FIGURA 4.3 – MONTAGEM CAD DO CABEÇOTE E DE PARTE DOS DUTOS DE ADMISSÃO E EXAUSTÃO. FONTE: AUTOR.....	116
FIGURA 4.4 – VISTA INTERNA DO MOTOR. FONTE: AUTOR	116
FIGURA 4.5 – DOMÍNIO COMPUTACIONAL PARA AS SIMULAÇÕES NUMÉRICAS. FONTE: AUTOR.....	117
FIGURA 4.6 – VISTA EM DETALHE DO VOLUME INTERNO DO CILINDRO. FONTE: AUTOR.....	117
FIGURA 4.7 – PISTÕES INSTRUMENTADOS NO SCRE: (A) PARA A RAZÃO VOLUMÉTRICA DE COMPRESSÃO 11,5:1; (B) PARA A RAZÃO VOLUMÉTRICA DE COMPRESSÃO 12,0:1. FONTE: AUTOR.....	118
FIGURA 4.8 – DOMÍNIO COMPUTACIONAL PARA SIMULAÇÃO DO COEFICIENTE DE DESCARGA DIRETO DAS VÁLVULAS DE ADMISSÃO. FONTE: AUTOR.....	119
FIGURA 4.9 - DOMÍNIO COMPUTACIONAL PARA SIMULAÇÃO DO COEFICIENTE DE DESCARGA DAS VÁLVULAS DE EXAUSTÃO. FONTE: AUTOR	119
FIGURA 4.10 – DETALHE DO DESLOCAMENTO DA VÁLVULA DE ADMISSÃO. FONTE: AUTOR	120
FIGURA 4.11 – REFINAMENTOS FIXOS CILÍNDRICOS REPRESENTADOS PELAS REGIÕES QUADRADAS. FONTE: AUTOR.....	121
FIGURA 4.12 - VAZÃO MÁSSICA DE AR PARA O ESCOAMENTO DIRETO DA ADMISSÃO. FONTE: AUTOR	122
FIGURA 4.13 - VAZÃO MÁSSICA DE AR PARA O ESCOAMENTO REVERSO DA ADMISSÃO. FONTE: AUTOR ...	122
FIGURA 4.14 - VAZÃO MÁSSICA DE AR PARA O ESCOAMENTO DIRETO DA EXAUSTÃO. FONTE: AUTOR.....	123
FIGURA 4.15 - VAZÃO MÁSSICA DE AR PARA O ESCOAMENTO REVERSO DA EXAUSTÃO. FONTE: AUTOR...	123
FIGURA 4.16 – GEOMETRIA APÓS TRATAMENTO NO SPACECLAIM. FONTE: AUTOR	127
FIGURA 4.17 – GEOMETRIA SUBDIVIDIDA NO GEM3D. FONTE: AUTOR.....	127
FIGURA 4.18 – OBJETOS CRIADOS NO GT-POWER RELATIVO À SUBDIVISÃO DO GEM3D . FONTE: AUTOR	128
FIGURA 4.19 - MODELO TPA, ONDE OS BLOCOS EM VERDE REPRESENTAM A LOCALIZAÇÃO DOS SENSORES DE AQUISIÇÃO DAS PRESSÕES DE ADMISSÃO E EXAUSTÃO RESPECTIVAMENTE. FONTE: AUTOR	129
FIGURA 4.20 – DETALHE DA VERIFICAÇÃO DO ADIANTAMENTO DA ABERTURA DA VÁLVULA DE EXAUSTÃO. FONTE: AUTOR	130
FIGURA 4.21 – DIAGRAMA DE VÁLVULAS, EM DESTAQUE AS DIFERENÇAS NO TEMPO DA VÁLVULA DE EXAUSTÃO. FONTE: AUTOR	130
FIGURA 4.22 - PRESSÃO NO CILINDRO EM FUNÇÃO DO ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA A CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO 1 (E10, 3000 RPM E 6 BMEP) . FONTE: AUTOR	131
FIGURA 4.23 - LOGARITMO DA PRESSÃO NO CILINDRO EM FUNÇÃO DO LOGARITMO DA RAZÃO DO VOLUME DO CILINDRO E O VOLUME MÁXIMO DO CILINDRO PARA A CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO 1 (E10, 3000 RPM E 6 BMEP). FONTE: AUTOR	131
FIGURA 4.24 - MASSA APRISIONADA NO CILINDRO EM FUNÇÃO DO ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR CALCULADA NO GT-POWER PARA A CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO 1 (E10, 3000 RPM E 6 BMEP) . FONTE: AUTOR.....	132

FIGURA 4.25 – TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR EM FUNÇÃO DO ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR CALCULADA NO GT-POWER PARA A CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO 1 (E10, 3000 rpm e 6 BMEP). FONTE: AUTOR	132
FIGURA 4.26 - ENERGIA LIBERADA ACUMULADA EM FUNÇÃO DO ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR CALCULADA NO GT-POWER PARA A CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO 1 (E10, 3000 rpm e 6 BMEP). FONTE: AUTOR	133
FIGURA 4.27 - MODELO COMPLETO, ONDE OS BLOCOS EM VERDE REPRESENTAM O INÍCIO DA ADMISSÃO E O FINAL DA EXAUSTÃO, AMBOS À TEMPERATURA E PRESSÕES AMBIENTE. FONTE: AUTOR	134
FIGURA 4.28 - PRESSÃO NO CILINDRO EM FUNÇÃO DO ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA A CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO 2 (E22, 3000 rpm e 6 BMEP). FONTE: AUTOR.....	135
FIGURA 4.29 - LOGARITMO DA PRESSÃO NO CILINDRO EM FUNÇÃO DO LOGARITMO DA RAZÃO DO VOLUME DO CILINDRO E O VOLUME MÁXIMO DO CILINDRO PARA A CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO 2 (E22, 3000 rpm e 6 BMEP). FONTE: AUTOR	136
FIGURA 4.30 - PRESSÃO DA ADMISSÃO EM FUNÇÃO DO ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA A CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO 2 (E22, 3000 rpm e 6 BMEP). FONTE: AUTOR.....	136
FIGURA 4.31 - PRESSÃO DA EXAUSTÃO EM FUNÇÃO DO ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA A CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO 2 (E22, 3000rpm e 6BMEP). FONTE: AUTOR	137
FIGURA 4.32 - MASSA APRISIONADA NO CILINDRO EM FUNÇÃO DO ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR CALCULADA NO GT-POWER PARA A CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO 2 (E22, 3000 rpm e 6 BMEP). FONTE: AUTOR.....	137
FIGURA 4.33 - TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR EM FUNÇÃO DO ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR CALCULADA NO GT-POWER PARA A CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO 2 (E22, 3000 rpm e 6 BMEP). FONTE: AUTOR	138
FIGURA 4.34 - ENERGIA LIBERADA ACUMULADA EM FUNÇÃO DO ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR CALCULADA NO GT-POWER PARA A CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO 2 (E22, 3000 rpm e 6 BMEP). FONTE: AUTOR	138
FIGURA 4.35 – RESULTADOS NUMÉRICOS E EXPERIMENTAIS (POR SHADOWGRAFIA) DO DESENVOLVIMENTO DO SPRAY APÓS O AJUSTE DAS CONSTANTES DO MODELO KH-RT. FONTE: RETIRADO DE (BRAGA, ET AL., 2017).....	141
FIGURA 4.36 - DOMÍNIO COMPUTACIONAL E MALHA SUPERFICIAL DA SIMULAÇÃO TRIDIMENSIONAL. FONTE: AUTOR.....	142
FIGURA 4.37 – DETALHE DA MALHA SUPERFICIAL. FONTE: AUTOR	143
FIGURA 4.38 – REGIÕES QUADRADA E CÔNICA REPRESENTAM RESPECTIVAMENTE OS REFINAMENTOS FIXOS DO CILINDRO E DA INJEÇÃO DE COMBUSTÍVEL. FONTE: AUTOR	144
FIGURA 4.39 – DESTAQUE PARA A REGIÃO CIRCULAR PRÓXIMA DA CENTELHA ELÉTRICA QUE DELIMITA O REFINAMENTO FIXO. FONTE: AUTOR	144
FIGURA 4.40 – REFINAMENTO DA MALHA NA REGIÃO DA FRENTE DE CHAMA GERADO PELO AMR DE 2 NÍVEIS. FONTE: AUTOR.....	146
FIGURA 4.41 - REFINAMENTO DA MALHA NA REGIÃO DA FRENTE DE CHAMA GERADO PELO AMR DE 3 NÍVEIS. FONTE: AUTOR.....	146
FIGURA 4.42 - REFINAMENTO DA MALHA NA REGIÃO DA FRENTE DE CHAMA GERADO PELO AMR DE 4 NÍVEIS. FONTE: AUTOR.....	147
FIGURA 4.43 - REFINAMENTO DA MALHA NA REGIÃO DA FRENTE DE CHAMA GERADO PELO AMR DE 5 NÍVEIS. FONTE: AUTOR.....	147
FIGURA 4.44 – PRESSÃO NO CILINDRO EM FUNÇÃO DO ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA A AVALIAÇÃO DAS MALHAS GERADAS PELA VARIAÇÃO DOS NÍVEIS DE AMR. FONTE: AUTOR	148
FIGURA 4.45 – TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR EM FUNÇÃO DO ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA A AVALIAÇÃO DAS MALHAS GERADAS PELA VARIAÇÃO DOS NÍVEIS DE AMR. FONTE: AUTOR.....	149
FIGURA 4.46 – TEMPERATURA AO LONGO DA FRENTE DE CHAMA PARA AS QUATRO MALHAS AVALIADAS. FONTE: AUTOR	150
FIGURA 5.1 - PRESSÃO NO CILINDRO POR ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA OS CASOS 1, 2 E 3 EM COMPARAÇÃO AOS DADOS EXPERIMENTAIS). FONTE: AUTOR.....	154
FIGURA 5.2 - TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR POR ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA OS CASOS 1, 2 E 3 EM COMPARAÇÃO AOS DADOS DO GT-POWER. FONTE: AUTOR.....	156
FIGURA 5.3 - FRAÇÃO DE MASSA QUEIMADA POR ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA OS CASOS 1, 2 E 3 EM COMPARAÇÃO AOS DADOS DO GT-POWER . FONTE: AUTOR.....	157
FIGURA 5.4 - RAZÃO DE EQUIVALÊNCIA A $-22,5^\circ$ DE EIXO DO MOTOR, INSTANTES ANTES DA CENTELHA ELÉTRICA ($-18,5^\circ$). FONTE: AUTOR.....	159
FIGURA 5.5 – FRENTE DE CHAMA NO PLANO NORMAL AO EIXO X A $-7,5^\circ$. FONTE: AUTOR	160

FIGURA 5.6 - FRENTE DE CHAMA NO PLANO NORMAL AO EIXO X A $-2,5^\circ$, PRÓXIMO A 10% DA FRAÇÃO DE MASSA QUEIMADA EXPERIMENTAL. FONTE: AUTOR	161
FIGURA 5.7 - FRENTE DE CHAMA NO PLANO NORMAL AO EIXO X A 8° , SENDO O MBF 50 EXPERIMENTAL DE $7,24^\circ$. FONTE: AUTOR.....	161
FIGURA 5.8 - FRENTE DE CHAMA NO PLANO NORMAL AO EIXO Y A 8° , SENDO O MBF 50 EXPERIMENTAL DE $7,24^\circ$. FONTE: AUTOR.....	162
FIGURA 5.9 - FRENTE DE CHAMA NO PLANO NORMAL AO EIXO Y A 13° . FONTE: AUTOR	162
FIGURA 5.10 - COMPARAÇÃO DAS DIFERENÇAS PERCENTUAIS DE CADA MECANISMO EM RELAÇÃO AOS DADOS EXPERIMENTAIS E DADOS DO GT-POWER. FONTE: AUTOR	164
FIGURA 5.11 - PRESSÃO NO CILINDRO NUMÉRICO E EXPERIMENTAL POR ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA O CASO 4 (COMBUSTÍVEL E22). FONTE: AUTOR.....	165
FIGURA 5.12 - TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR (LINHA CHEIA), FRAÇÃO DE MASSA QUEIMADA (LINHA PONTILHADA) NUMÉRICO E DO GT-POWER POR ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA O CASO 4 (COMBUSTÍVEL E22). FONTE: AUTOR.....	166
FIGURA 5.13 - PRESSÃO NO CILINDRO NUMÉRICO E EXPERIMENTAL POR ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA O CASO 5 (COMBUSTÍVEL E50). FONTE: AUTOR.....	168
FIGURA 5.14 - TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR (LINHA CHEIA), FRAÇÃO DE MASSA QUEIMADA (LINHA PONTILHADA) NUMÉRICO E DO GT-POWER POR ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA O CASO 5 (COMBUSTÍVEL E50). FONTE: AUTOR.....	169
FIGURA 5.15 - PRESSÃO NO CILINDRO POR ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA O CASO 6 (COMBUSTÍVEL E85) EM COMPARAÇÃO AOS DADOS EXPERIMENTAIS. FONTE: AUTOR.....	170
FIGURA 5.16 - TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR (LINHA CHEIA), FRAÇÃO DE MASSA QUEIMADA (LINHA PONTILHADA) NUMÉRICO E GT-POWER POR ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA O CASO 6 (COMBUSTÍVEL E85). FONTE: AUTOR.....	171
FIGURA 5.17 - PRESSÃO NO CILINDRO POR ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA O CASO 7 (COMBUSTÍVEL E100) EM COMPARAÇÃO AOS DADOS EXPERIMENTAIS. FONTE: AUTOR.....	172
FIGURA 5.18 - TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR (LINHA CHEIA), FRAÇÃO DE MASSA QUEIMADA (LINHA PONTILHADA) NUMÉRICO E DO GT-POWER POR ÂNGULO DO EIXO DO MOTOR PARA O CASO 7 (COMBUSTÍVEL E100). FONTE: AUTOR.....	173
FIGURA 5.19 - IMEP NUMÉRICO 3D E EXPERIMENTAL PARA OS 4 CASOS. FONTE: AUTOR	174
FIGURA 5.20 - PRESSÃO MÁXIMA NO CILINDRO NUMÉRICO 3D E EXPERIMENTAL PARA OS 4 CASOS. FONTE: AUTOR.....	174
FIGURA 5.21 - ÂNGULO DE PRESSÃO MÁXIMA NO CILINDRO NUMÉRICO 3D E EXPERIMENTAL PARA OS 4 CASOS. FONTE: AUTOR	175
FIGURA 5.22 - MBF 50 NUMÉRICO 3D E EXPERIMENTAL PARA OS 4 CASOS. FONTE: AUTOR.....	176
FIGURA 5.23 - MBF 10-90 NUMÉRICO 3D E EXPERIMENTAL PARA OS 4 CASOS. FONTE: AUTOR	177
FIGURA 5.24 - MBF 10-50 NUMÉRICO 3D E EXPERIMENTAL PARA OS 4 CASOS. FONTE: AUTOR	178
FIGURA 5.25 - MBF 50-90 NUMÉRICO 3D E EXPERIMENTAL PARA OS 4 CASOS. FONTE: AUTOR	178
FIGURA 5.26 - EFICIÊNCIA DE CONVERSÃO DE COMBUSTÍVEL NUMÉRICO 3D E DO GT-POWER PARA OS 4 CASOS. FONTE: AUTOR	179
FIGURA 5.27 - EFICIÊNCIA DA COMBUSTÃO NUMÉRICO 3D E DO GT-POWER PARA OS 4 CASOS. FONTE: AUTOR.....	179
FIGURA 5.28 - COMPARAÇÃO DAS DIFERENÇAS PERCENTUAIS DE CADA MECANISMO EM RELAÇÃO AOS DADOS EXPERIMENTAIS E DADOS DO GT-POWER. FONTE: AUTOR	180

LISTA DE TABELAS

TABELA 3.1 – PROPRIEDADES DA GASOLINA E ETANOL.....	43
TABELA 3.2 – MECANISMOS CINÉTICOS QUÍMICOS PARA O ETANOL	63
TABELA 3.3 – MECANISMOS CINÉTICOS QUÍMICOS PARA A GASOLINA.....	65
TABELA 3.4 – MECANISMOS CINÉTICOS QUÍMICOS PARA MISTURAS DE GASOLINA E ETANOL	66
TABELA 3.5 - CONSTANTE C_2 PARA WOSCHNI GT-POWER. FONTE: RETIRADO DE (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017).....	71
TABELA 3.6 – VALORES DAS CONSTANTES DO MODELO RNG K- ϵ NO CONVERGE CFD. FONTE: RETIRADO DE (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017)	83
TABELA 3.7 – CONSTANTES PARA A DISTORÇÃO DA GOTA. FONTE: RETIRADO DE (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017).....	91
TABELA 3.8 – RELAÇÃO DE ALGUNS TRABALHOS NA AVALIAÇÃO DE MECANISMOS CINÉTICOS	109
TABELA 4.1 – COMPOSIÇÃO VOLUMÉTRICA DOS COMBUSTÍVEIS UTILIZADOS. FONTE: AUTOR	114
TABELA 4.2 - CARACTERÍSTICAS DO SCRE. FONTE: AUTOR.....	115
TABELA 4.3 – CÁLCULO DO COEFICIENTE DA DESCARGA DA ADMISSÃO. FONTE: AUTOR	124
TABELA 4.4 – CÁLCULO DO COEFICIENTE DE DESCARGA DA EXAUSTÃO. FONTE: AUTOR	124
TABELA 4.5 – CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO DO SCRE. FONTE: AUTOR.....	125
TABELA 4.6 – RESULTADOS COMPARATIVOS DAS CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO SIMULADAS. FONTE: AUTOR	139
TABELA 4.7 – POSICIONAMENTO E DIREÇÃO DOS FUROS DO INJETOR BOSCH HDEV 5.1. FONTE: RETIRADO DE (REIS, ET AL., 2016).....	140
TABELA 4.8 – COEFICIENTES DE DIFUSIVIDADE MÁSSICA. FONTE: AUTOR.....	142
TABELA 4.9 – REFINAMENTO FIXO PARA CRIAÇÃO DA MALHA VOLUMÉTRICA. FONTE: AUTOR	145
TABELA 4.10 – VALORES DA SIMULAÇÃO REFERENTES A CADA AMR AVALIADO. FONTE: AUTOR.....	148
TABELA 4.11 – DIFERENÇAS PERCENTUAIS ENTRE OS AMR. FONTE: AUTOR	150
TABELA 4.12 – RESUMO DAS SIMULAÇÕES TRIDIMENSIONAIS REALIZADAS. FONTE: AUTOR	153
TABELA 5.1 – COMPARAÇÃO ENTRE OS DADOS EXPERIMENTAIS, GT-POWER, CASO 1 (ABIANEH), CASO 2 (COTA 75 ESPÉCIES) E CASO 3 (COTA 115 ESPÉCIES). FONTE: AUTOR	158
TABELA 5.2 – DIFERENÇA PERCENTUAL DO CASO 1 (ABIANEH), DO CASO 2 (COTA 75 ESPÉCIES) E DO CASO 3 (COTA 115 ESPÉCIES) EM RELAÇÃO AOS DADOS EXPERIMENTAIS. FONTE: AUTOR.....	158
TABELA 5.3 – EFICIÊNCIAS DE CONVERSÃO DE COMBUSTÍVEL E DA COMBUSTÃO. FONTE: AUTOR	163

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AMR	Do inglês, <i>Adaptive Mesh Refinement</i>
BMEP	Pressão média efetiva de eixo (do inglês, <i>Break Mean Effective Pressure</i>)
CA	Ângulo de eixo do motor (do inglês, <i>Crank angle</i>)
CAD	Do inglês, <i>Computer Assisted Design</i>
CFD	Dinâmica dos Fluidos Computacional (do inglês, <i>Computational Fluid Dynamics</i>)
CO	Monóxido de carbono
CO ₂	Dióxido de carbono
CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente
COV	Compostos orgânicos voláteis
CTM	Centro de Tecnologia da Mobilidade
DI	Injeção direta (do inglês, <i>Direct Injection</i>)
DNS	Do inglês, <i>Direct Numerical Simulation</i>
E10	Gasolina com adição de 10% de etanol anidro
E22	Gasolina com adição de 22% de etanol anidro
E50	Gasolina com adição de 50% de etanol anidro
E85	Gasolina com adição de 85% de etanol anidro
E100	Etanol com adição de 4% de água
EGR	Recirculação dos gases de exaustão (do inglês, <i>Exhaust Gas Recirculation</i>)
FCA	Fiat Chrysler Automobiles
FMEP	Pressão média efetiva de fricção (do inglês, <i>Friction Mean Effective Pressure</i>)
HC	Hidrocarbonetos
HCCI	Ignição por compressão de carga homogênea (do inglês, <i>Homogeneous charge compression ignition</i>)
IMEP	Pressão média efetiva indicada (do inglês, <i>Indicated Mean Effective Pressure</i>)
INOVAR-AUTO	Programa de Incentivo à Inovação Tecnológica e Adensamento da Cadeia Produtiva de Veículos Automotores
KH	Modelo de Kelvin-Helmholtz
KH-RT	Modelo combinado de Kelvin-Helmholtz e Rayleigh-Taylor

LES	Do inglês, <i>Large Eddy Simulation</i>
MBF	Frações de massa queimada (do inglês, <i>Mass Fraction Burned</i>)
MBT	Mínimo avanço para o melhor torque (do inglês, <i>minimum spark advance for the best torque</i> ou <i>maximum break torque</i>)
MEP	Pressão média efetiva (do inglês, <i>Mean Effective Pressure</i>)
MON	Número de octanas motor (do inglês, <i>Motor Octane Number</i>)
NO	Monóxido de nitrogênio
NO _x	Óxidos de Nitrogênio
NSC	Do inglês, <i>Nagle and Strickland-Constable</i>
NTC	Do inglês, <i>No Time Counter</i>
PFI	Injeção no pósito de admissão (do inglês, <i>Port Fuel Injection</i>)
PMEP	Pressão média efetiva de bombeamento (do inglês, <i>Pumping Mean Effective Pressure</i>)
PMI	Ponto morto superior
PMS	Ponto morto inferior
PRF	Combustível de referência primária (do inglês, <i>Reference Primary Fuel</i>)
PROÁLCOOL	Programa Nacional do Álcool
PROCONVE	Programa brasileiro de controle de emissões veiculares
RANS	Do inglês, <i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>
RPM	Rotações por minuto
RT	Modelo de Rayleigh-Taylor
RON	Número de octano pesquisa (do inglês, <i>Research Octane Number</i>)
SCRE	Monocilindro de Pesquisa (do inglês, <i>Single Cylinder Research Engine</i>)
SUNDIALS	Do inglês, <i>SUite of Nonlinear and DIfferential/ALgebraic equation Solvers</i>
TRF	Combustível de referência ternário (do inglês, <i>Ternary Reference Fuel</i>)
TAB	Do inglês, <i>Taylor Analogy Breakup</i>
TPA	Do inglês <i>Three Pressure Analyse</i>
PISO	Do inglês, <i>Pressure Implicit with Splitting of Operators</i>
UFMG	Universidade Federal de Minas Gerais

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Latinas		Unidade
A	Área do fluxo transversal	m^2
A/F	Relação ar/combustível	-
a_i	Aceleração normal	m/s^2
A_{eff}	Área para fluxo	m^2
A_r	Área de referência	m^2
A_S	Calor transferido pela área superficial	J/m^2
A_{sf}	Fator pré-exponencial de Arrhenius	-
$A_{\alpha,i}$	Área da projeção do vetor na face α	m^2
B	Diâmetro do cilindro	m
B_0	Constante do modelo tipicamente definida para 0,61	-
B_1	Constante do tempo de quebra	-
c	Velocidade do som	m/s
C_1	Constante do modelo WoschniGT	-
C_2	Constante do modelo WoschniGT	-
Cd	Coefficiente de descarga	-
C_D	Coefficiente de arrasto dinâmico	-
C_f	Fator de fricção de Fanning	-
$\bar{c}_{p,m}$	Calor específico a pressão constante molar para a espécie m	kJ/kg
C_μ	Constante do modelo de turbulência	-
d	Diâmetro da gota	m
D	Diâmetro equivalente	m
D_t	Coefficiente de difusão mássica	m^2/s
D_{val}	Diâmetro da válvula	m
e	Energia interna total	J
E	Energia de ativação	J
e_b	Energia da zona queimada	J
E_{sf}	Energia de ativação	J
e_u	Energia da zona não queimada	J
h	Coefficiente de transferência de calor	W/m^2K
H	Entalpia específica total	J
h_a	Entalpia da massa de ar	J
h_c	Coefficiente de transferência de calor convectivo	W/m^2K
h_f	Entalpia da massa de combustível	J
$h_{f,i}$	Entalpia da massa de combustível injetado	J
h_m	Entalpia da espécie m	J
\bar{h}_m	Entalpia específica molar para a espécie m	kJ/mol
k	Energia cinética turbulenta	J

K_1	Constante do modelo WoschniGT, que corresponde a 3,01426	-
K_2	Constante do modelo WoschniGT, que corresponde a 0,50	-
k_{fr}	Coefficiente de velocidade de reação direto	-
K_p	Coefficiente de perda por pressão	-
k_{pr}	Constante de equilíbrio	-
k_{rr}	Coefficiente de velocidade de reação reverso	-
K_t	Condutividade turbulenta	W/(mK)
L_b	Comprimento de quebra	m
L_{val}	Levante da válvula	m
m	Massa do volume	kg
M	Numéro total de espécies	-
\dot{m}	Fluxo de massa na fronteira do volume	kg/h
m_a	Massa de ar	kg
m_{AR}	Vazão mássica de ar	kg/h
m_b	Massa da zona queimada	kg
\dot{m}_{comb}	Vazão mássica de combustível	kg/h
M_d	Massa da gota	kg
mep	Pressão média efetiva	bar
m_f	Massa de combustível	kg
M_{form}	Massa das espécies formada de particulados	kg
M_s	Produção de massa de particulados	kg
M_{sf}	Taxa de formação de massa do particulado	kg/h
M_{so}	Taxa de oxidação dessa massa de particulado	kg/h
m_u	Massa da zona não queimada	kg
$m_{uf,i}$	Massa de combustível injetado,	kg
MW_c	Peso molecular de carbono	kg/kmol
n	Expoente da temperatura	-
N	Número de revoluções por minuto	-
n_r	Número de rotações por ciclo de trabalho	-
p	Pressão no cilindro	Pa
P	Pressão	Pa
P_{atm}	Pressão atmosférica	Pa
p_i	Pressão instantânea do fluido	Pa
p_m	Pressão do fluido em <i>motoring</i> no mesmo ângulo que p	Pa
P_o	Pressão de estagnação	Pa
P_r	Pressão do fluido de trabalho antes da combustão	Pa
\dot{Q}	Taxa de liberação de calor	J/s
Q_b	Taxa de transferência de calor da zona queimada	J/s
q_g	Maior número de gotas	-
Q_u	Taxa de transferência de calor da zona não queimada	J/s
r	Raio da gota	m
R	Numéro total de reações	-

r_c	Razão volumétrica de compressão	-
Re_d	Número de Reynolds da gota	-
Re_l	Número de Reynolds	-
R_u	Constante universal dos gases	J/(mol.k)
S	Termo fonte de energia	J
Sc	Número de Schimit	-
S_i	Termo fonte	
Sh_d	Número de Sherwood	-
S_m	Termo fonte	
\bar{S}_p	Velocidade média do pistão	m/s
t	Tempo	s
T	Temperatura	K
T_d	Temperatura da gota	K
T_{fluido}	Temperatura do fluido	K
T_{gas}	Temperatura do gas	K
T_o	Temperatura de estagnação	K
T_{parede}	Temperatura da parede	K
T_r	Temperatura do fluido de trabalho antes da combustão	K
u	Velocidade do fluido	m/s
u_i	Velocidade na direção i	m/s
\bar{u}_i	Velocidade média na direção i	m/s
u'_i	Varição da velocidade na direção i	m/s
u_j	Velocidade na direção j	m/s
u'_j	Varição da velocidade na direção j	m/s
$u_{rel,}$	Velocidade relativa entre o gás e a gota	m/s
V	Volume	m ³
$v'_{m,r}$	Coefficiente estequiométrico do reagente para as espécies m e reações r	mol
$v''_{m,r}$	Coefficiente estequiométrico dos produto para as espécies m e reações r	mol
V_b	Volume da zona queimada	m ³
V_c	Volume morto	m ³
V_d	Volume deslocado	m ³
v_i	Velocidade da gota	m/s
V_n	Componente normal da velocidade da gota em direção a superfície	m/s
V_p	volume todas as gotas p na célula que colidiram com a parede em um dado passo de tempo	m ³
V_r	Volume do fluido de trabalho antes da combustão	m ³
V_u	Volume da zona não queimada	m ³
w	Velocidade média do gás do cilindro	m/s
We_g	Número de Webber do gás	-

We_i	Número de Weber da gota	-
We_l	Número de Webber do líquido	-
x	Comprimento de discretização	m
x_i	Direção i	-
x_j	Direção j	-
X_m	Simbolo químico para as espécies m	-
$[X_m]$	Concentração molar da espécie m	mol/l
γ	Distorção de gota	m
Y_1^*	Fração mássica de vapor na superfície da gota	-
Y_1	Fração mássica de vapor	-
Y_m	Fração mássica da espécie m	-
Z	Número de Ohnesorge	-

Letras Gregas

γ	Razão entre os coeficientes de calor específico a pressão constante e o volume constante	-
δ	Espessura da camada limite	m
δ_{ij}	Função delta de Kronecker	-
ε	Dissipação da energia cinética turbulenta	m^2/s^2
θ	Ângulo de virabrequim instantâneo	°
λ	Coefficiente de ar ou relação de ar	-
Λ	Comprimento de onda	m
Λ_{RT}	Comprimento de onda da instabilidade de RT	m
μ	Viscosidade dinâmica	$N.s/m^2$
μ'	Viscosidade de dilatação	$N.s/m^2$
μ_{air}	Viscosidade do ar	$N.s/m^2$
μ_l	Viscosidade do líquido	$N.s/m^2$
μ_t	Viscosidade turbulenta	$N.s/m^2$
π	Pi	-
ρ	Densidade do fluido	kg/m^3
ρ_l	Densidade do líquido	kg/m^3
ρ_m	Densidade de cada espécie m	kg/m^3
σ	Tensão superficial do líquido	N/m
σ_{ij}	Tensões viscosas	N/m^2

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	21
2 OBJETIVOS E RELEVÂNCIA	25
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	26
3.1 MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA	26
3.1.1 <i>Ciclo ideal para motores de ignição por centelha</i>	27
3.1.2 <i>Ciclo real ou indicado para motores de ignição por centelha</i>	29
3.1.3 <i>Parâmetros de desempenho em motores de combustão interna</i>	32
3.2 COMBUSTÍVEIS	36
3.2.1 <i>Gasolina</i>	37
3.2.2 <i>Etanol</i>	39
3.2.3 <i>Índice de octano e características da Gasolina e do Etanol</i>	42
3.3 FORMAÇÃO DA MISTURA AR-COMBUSTÍVEL	44
3.3.1 <i>Injeção direta de combustível</i>	44
3.3.2 <i>Movimento de carga dentro do cilindro</i>	47
3.3.3 <i>Composição da mistura ar-combustível</i>	49
3.4 ASPECTOS GERAIS DA COMBUSTÃO	53
3.4.1 <i>Desenvolvimento da Combustão</i>	54
3.4.2 <i>Modelagem da Combustão</i>	58
3.5 MODELOS CINÉTICOS QUÍMICOS	60
3.5.1 <i>Mecanismos Cinéticos para o Etanol</i>	61
3.5.2 <i>Mecanismos Cinéticos para a Gasolina</i>	63
3.5.3 <i>Mecanismos Cinéticos Químicos para a Mistura de Gasolina e Etanol</i>	65
3.6 SOLUÇÃO NUMÉRICA.....	67
3.7 MODELAGEM UNIDIMENSIONAL DE MOTORES	68
3.7.1 <i>Equações governantes</i>	69
3.7.2 <i>Correlação de Woschni</i>	70
3.7.3 <i>Combustão em duas zonas</i>	72
3.7.4 <i>Modelo Prescritivo - Combustão por Wiebe</i>	73
3.7.5 <i>Modelo Prescritivo - Taxa de Queima pelo TPA</i>	75
3.8 MODELAGEM TRIDIMENSIONAL DE MOTORES.....	76
3.8.1 <i>Equações governantes em escoamento de fluidos</i>	77
3.8.2 <i>Modelos de Turbulência</i>	79
3.8.3 <i>Injeção de combustível</i>	83
3.8.4 <i>Processo de Combustão</i>	96
3.9 ESTADO DA ARTE.....	102
3.9.1 <i>Modelagem unidimensional de motores</i>	103
3.9.2 <i>Modelagem tridimensional de motores com o uso de mecanismos cinéticos químicos</i>	106
3.10 CONSIDERAÇÕES FINAIS	109
4 METODOLOGIA.....	111
4.1 COMBUSTÍVEIS UTILIZADOS.....	113
4.2 OBJETO DE ESTUDO: MOTOR UTILIZADO	114
4.3 DOMÍNIO COMPUTACIONAL.....	115
4.4 COEFICIENTE DE DESCARGA DAS VÁLVULAS	118
4.4.1 <i>Cálculo do coeficiente de descarga das válvulas</i>	122
4.5 CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO	125
4.6 METODOLOGIA NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL.....	126
4.6.1 <i>Criação do modelo no GT-Power</i>	127

4.6.2	<i>Modelo TPA - Three Pressure Analys</i>	128
4.6.3	<i>Condição de Operação 1 – TPA</i>	129
4.6.4	<i>Modelo Completo: Combustão por Wiebe</i>	133
4.6.5	<i>Condição de Operação 2, 3, 4 e 5 – Modelo completo</i>	135
4.7	METODOLOGIA NUMÉRICA TRIDIMENSIONAL	139
4.7.1	<i>Injeção de Combustível</i>	140
4.7.2	<i>Geração de Malha</i>	142
4.7.3	<i>Teste de Sensibilidade da Malha para o AMR</i>	145
4.7.4	<i>Condições de Contorno e Condições de Inicialização</i>	151
4.7.5	<i>Método de Simulação</i>	152
4.8	CONSIDERAÇÕES FINAIS	153
5	RESULTADOS E ANÁLISES	154
5.1	ANÁLISE DOS MECANISMOS CINÉTICOS QUÍMICOS	154
5.2	COMPORTAMENTO DO MECANISMO CINÉTICO QUÍMICO EM DIFERENTES COMBUSTÍVEIS	165
5.3	CONSIDERAÇÕES FINAIS	181
6	CONCLUSÕES	182
6.1	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	184
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	185
	ANEXO A	193
	ANEXO B	198

1. INTRODUÇÃO

A população mundial foi estimada em 2017 em 7,6 bilhões (ONU News, 2017) de pessoas e a projeção para 2035 é de 8,8 bilhões de habitantes (BP Energy Outlook , 2017). Apesar de uma taxa de crescimento lenta da população mundial, a demanda global de energia com os padrões de vida atual cresce a uma taxa superior (Figura 1.1) e a projeção para as próximas décadas só acentua os problemas energéticos que estamos enfrentando. A disponibilidade de recursos energéticos está se tornando cada vez mais limitada, principalmente por ainda se basear em recursos não renováveis. O petróleo, por exemplo, representou, em 2015, cerca de 33% da energia mundial consumida, porém de acordo com as reservas mundiais, a matriz fóssil será capaz de atender somente os próximos 52,8 anos (BP Statistical Review, 2016).

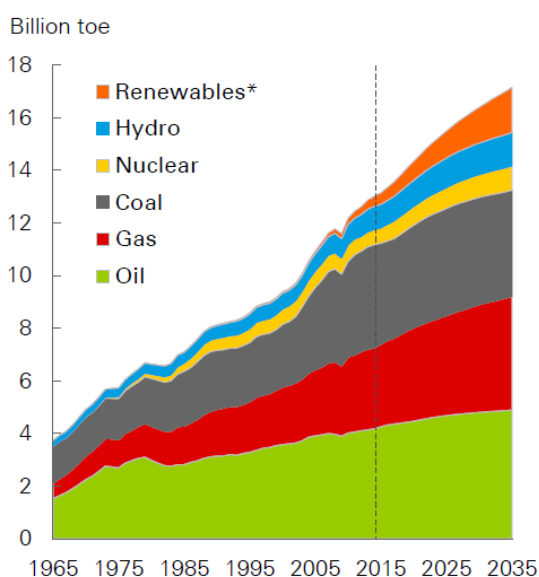


Figura 1.1- Consumo mundial de energia por combustível. Fonte: retirado de (BP Energy Outlook , 2017)

A dependência por combustíveis fósseis e as reservas em declínio criam um paradoxo no setor energético. Aliado às mudanças climáticas, tais como elevação do nível do mar, diminuição de fontes de água potável, consequência do aquecimento terrestre, levaram à necessidade de limitação ou redução das emissões de gases de Efeito Estufa (United Nations, 1998). Direcionando, assim, a atenção mundial ao uso da energia de forma mais sustentável.

O Efeito Estufa é um fenômeno natural terrestre que permite a manutenção da temperatura global. Entretanto, o rápido crescimento da atividade humana, consequência da Revolução Industrial, resultou num aumento significativo de Dióxido de Carbono (CO₂) na atmosfera. Esse excesso de CO₂ desencadeou de forma prejudicial o aumento da temperatura média global, fenômeno também nomeado de “Efeito Estufa”.

Dentro desse contexto, o setor de transporte é responsável por cerca de um quarto da emissão mundial de CO₂ e consome mais da metade da produção global de petróleo (Miller, et al., 2014) (IEA, 2016) (Miller, et al., 2017). Programas para controlar as emissões de poluentes atmosféricos dos veículos a motor têm sido implantados nos Estados Unidos e na União Europeia desde a década de 1960. Esses programas evoluíram, tornando-se normas nacionais e acordos internacionais, expandindo-se além do controle das emissões de poluentes, como também no desenvolvendo de novas tecnologias, economia de combustível, uso de energia renováveis e esforços conjuntos de setores públicos e privados.

O Brasil emitiu o equivalente de 105 milhões de toneladas de CO₂ e consumiu mais de 700.000 barris de petróleo por dia em veículos de passeio em 2015 (Posada, et al., 2017). Para os classificados Veículos Leves (com até 3.856 Kg de peso bruto total), os primeiros esforços brasileiros para o controle das emissões começaram em 1986 pelo Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA), com a adoção da resolução nº 18/1986.

Nesses 32 anos de implementação, o PROCONVE (Programa brasileiro de controle de emissões veiculares) foi se aperfeiçoando, tendo seis fases de implementação e atingindo níveis de reduções acima de 95% para os principais poluentes veiculares: Monóxido de Carbono (CO), Hidrocarbonetos (HC) e Óxidos de Nitrogênio (NOx) (Dallmann, et al., 2017). Além da redução dos níveis de emissão de poluentes por veículos automotores, o PROCONAVE tem como objetivos a promoção do desenvolvimento tecnológico nacional e de programas de inspeção de características técnicas dos combustíveis líquidos postos à disposição da frota nacional de veículos automotores.

Juntamente com as regulamentações do PROCONVE, dois outros programas modificaram a frota brasileira de veículos leves. O primeiro deles, em ordem cronológica, é o Proálcool (Programa Nacional do Álcool), criado em 1975 (decreto nº

76.593) durante a crise do petróleo e com a finalidade de reduzir a dependência do mesmo. O programa ainda existente, mas teve altos e baixos durante as últimas décadas. Na sua primeira fase, obrigou a adição de 10% de etanol hidratado à gasolina, evoluindo para o etanol anidro em teores de 20 a 25% em 1990 e atingindo a marca de 27% em março de 2015. Porém a sua principal consequência foi a mudança da frota brasileira em relação à composição do combustível para os veículos Otto. Em 2003, com a vinda do motor multicomcombustível, houve grande absorção pelo mercado consumidor, sendo que atualmente mais de 90% dos carros de passeio vendidos apresentam essa flexibilidade no motor (Dallmann, et al., 2017) (Pousada, et al., 2015).

O segundo programa de peso expressivo nesses últimos anos é o Inovar-Auto (Programa de Incentivo à Inovação Tecnológica e Adensamento da Cadeia Produtiva de Veículos Automotores). Criado em 2012 pela lei nº 12.715/2012 e de caráter temporário (implementação de 2013 a 2017), o Inovar-Auto tem a finalidade, por meio de incentivos fiscais, de impulsionar a indústria automobilística, a competitividade nacional, a produção de veículos tecnologicamente avançados, mais seguros e eficientes (Inovar-auto, 2015) e nivelar a padrões internacionais (como na União Europeia e EUA), adotando tecnologias para a eficiência energética em todos os segmentos da categoria.

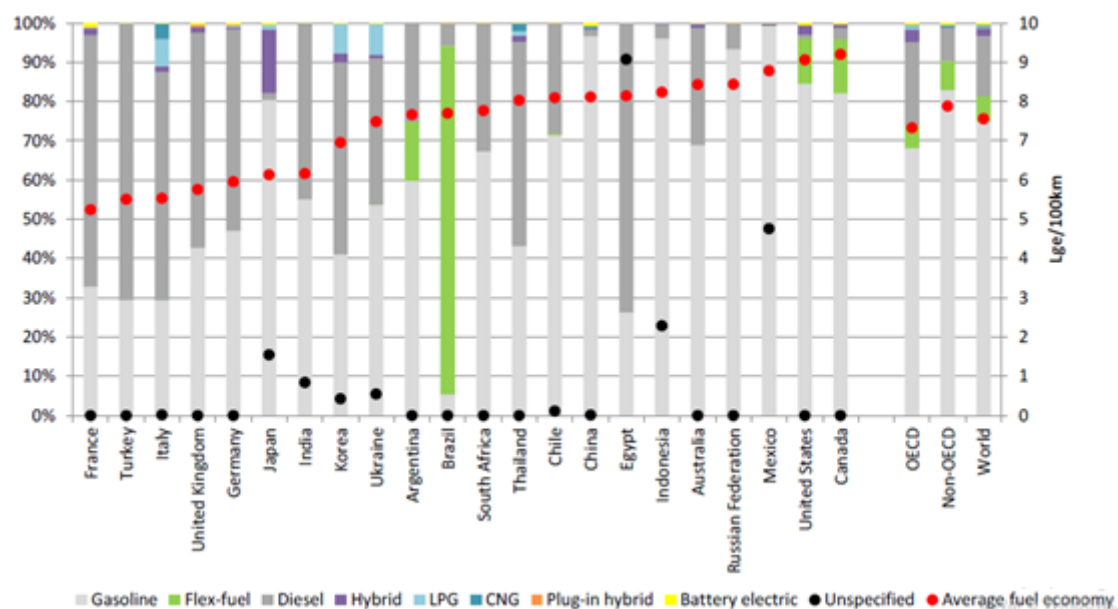


Figura 1.2 - Comparativo do grupo motopropulsor e consumo para veículos Leves em 2015. Fonte: retirado de (OECD, et al., 2017)

Nesse âmbito, é possível compreender a discrepância da força propulsora dos motores brasileiros em comparação aos outros países, como mostrado na Figura 1.2. Nos postos de combustíveis para veículos leves, encontram-se normalmente as seguintes opções: Gasolina C (mistura de gasolina e 27% de etanol anidro ($< 0,7\%v/v$ de água)), Etanol Hidratado ($< 7,4\%v/v$ de água), Diesel, Biodiesel e Gás Natural.

A produção de etanol é importante para o mercado nacional e, juntamente com os Estados Unidos, representou 86% da produção mundial de etanol combustível em 2015 (REN21, 2016); sendo uma fonte energética renovável e de grande absorção do mercado para os carros que utilizam motor multicomcombustível. Entretanto, mesmo com a possibilidade de escolha de diferentes misturas de gasolina com o etanol, uma fonte sustentável, em proporções baixas, médias e altas, ainda é necessário melhorar a sua eficiência energética e consumo específico para atingir níveis internacionais. Além disso, é preciso desenvolver melhores estratégias desse uso, propriedades do combustível, compatibilidades com o veículo, emissões de NOx, compostos orgânicos voláteis (COV), CO e particulados.

Essa pequena contextualização ressalta a necessidade ainda existente de estudos relacionados à combustão em motores veiculares, principalmente quando se trata da mistura de gasolina e etanol. Embora existam mecanismos químicos detalhados para prever a combustão do etanol, os da gasolina são bem mais complicados devido à grande variedade de fontes de petróleo bruto e processos de refinamento. Essa complexidade é refletida na mistura de gasolina-etanol. Assim, a Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) entra como uma ferramenta para modelar os fenômenos internos ocorridos no interior do motor. Sendo de menor custo que ensaios experimentais e conferindo amplos resultados para a compreensão dos fenômenos envolvidos.

2 OBJETIVOS E RELEVÂNCIA

Este trabalho visa a validação, com dados de ensaios experimentais, de mecanismos cinéticos químicos reduzidos da mistura gasolina-etanol utilizados no modelamento tridimensional por CFD de um motor monocilindro. Avaliando também o comportamento desse mecanismo na reprodução da combustão de diferentes composições da mistura de gasolina e etanol.

Sendo os objetivos específicos:

- Elaborar e validar o modelo numérico unidimensional do motor monocilindro de pesquisa com uma tolerância máxima de 5% de diferença em relação aos dados experimentais.
- Ajustar um modelo para a injeção de combustível a fim de obter uma melhor representação do mesmo.
- Elaborar um modelo numérico tridimensional do motor monocilindro de pesquisa com base nos ensaios experimentais realizados.
- Avaliar e validar os mecanismos cinéticos químicos reduzidos no modelo tridimensional para predição dos fenômenos envolvidos no funcionamento do motor.
- Analisar a eficácia desse mecanismo para diferentes composições de gasolina e etanol trabalhando em uma rotação e carga fixa (3000rpm e 6bar).

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão bibliográfica realizada para esse trabalho envolve os temas relacionados ao funcionamento e modelamento numérico de motores de combustão interna. Primeiramente, é apresentada uma revisão de motores enfocando seu funcionamento, combustíveis, formação da mistura e combustão. Em seguida, são destacados alguns fundamentos e desenvolvimentos de mecanismos cinéticos químicos. Em um terceiro momento, são apresentados alguns fundamentos de simulação numérica unidimensional e tridimensional por dinâmica dos fluidos computacional, com destaque para o modelamento da injeção de combustível e o processo de combustão. Por último, alguns trabalhos publicados de simulações numéricas unidimensionais e tridimensionais aplicadas a motores de combustão interna são discutidos.

3.1 MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA

O primeiro motor a explosão usado comercialmente foi criado pelo belga Étienne Leonir, patenteado em 1858. Era um motor de dois tempos alimentado por gás de iluminação e ignitado por uma bateria elétrica (Guia a história: carros, 2016). Dois anos depois, uma patente não publicada do engenheiro francês Alphonse Beau de Rochas foi encontrada. Datada do ano de 1884, ela propunha as condições de um motor de quatro tempos com ignição por centelha. Somente em 1876, segundo a patente dos engenheiros alemães Nikolaus Otto e Eugen Langen, iniciou-se a produção industrial de motores de combustão interna de quatro tempos, bateria elétrica, vela e bobina de ignição. Em 1897, na tentativa de seguir fielmente o princípio de Carnot, o alemão Rudolph Diesel desenvolveu um motor de quatro tempos, com injeção direta de combustível, alta razão volumétrica de compressão e sem ignição por centelha, ou seja, o combustível se autoignita (Ferguson, et al., 2016).

Os motores de combustão interna têm como principal objetivo a produção de potência mecânica vinda da energia química contida no combustível. Essa energia é liberada pela queima ou oxidação do combustível dentro do motor (Heywood, 1988).

Eles podem ser classificados pelo tipo de combustão: Combustão contínua como máquinas a vapor ou gás e Combustão Cíclica. Entre os que apresentam a Combustão Cíclica, podem ainda haver subclassificações pela forma como se dá a ignição da mistura. Caso ela seja espontânea, resultado das altas pressões e temperaturas produzidas durante a compressão da mistura no cilindro, característica dos motores movidos a Diesel. Caso contrário, ela será produzida por centelha, ou seja, por uma fonte externa, representado pelos motores híbridos ou motores com ignição por centelha (Bosh, 2005).

Outra classificação possível é pelo regime dominante de propagação de chamas: pré-misturada ou por difusão. No primeiro regime, chama pré-misturada, todo o ar presente na câmara de combustão é utilizado, a combustão ocorre rapidamente, propiciando o alcance de potências específicas altas. Já na propagação por difusão, a eficiência térmica aumenta com a redução da carga do motor, não havendo problemas de combustão anômala com o aumento do nível de turbo alimentação (Baeta, 2006).

Por último, os motores ainda podem ser classificados pelo ciclo de funcionamento: Motores de Dois Tempos e Motores de Quatro Tempos. Este trabalho vai se concentrar nos motores de quatro tempos de ignição por centelha.

3.1.1 CICLO IDEAL PARA MOTORES DE IGNIÇÃO POR CENTELHA

O ciclo ideal de um motor naturalmente aspirado de quatro tempos de ignição por centelha é aproximado pelo ciclo padrão de ar, comportando-se como gás ideal, como mostrado na Figura 3.1. Esse ciclo também é denominado ciclo OTTO em homenagem a um dos seus primeiros criadores. Ele é composto por quatro fases distintas, com dois processos isovolumétricos e dois isentrópicos. Sendo caracterizado pelo processo de combustão a volume constante.

Dessa forma, ao considerarmos um sistema fechado é possível descrever o ciclo ideal pelos pontos de 1 a 4 na Figura 3.1. A primeira fase é a compressão isoentropica. O pistão se desloca do PMI para o PMS (processo 1 → 2, Figura 3.1– a), comprimindo o ar de forma isentrópica (processo 1 → 2, Figura 3.1– b). Nessa etapa ocorre um aumento da pressão durante o curso de compressão, como também da temperatura dentro do cilindro devido ao aquecimento por compressão.

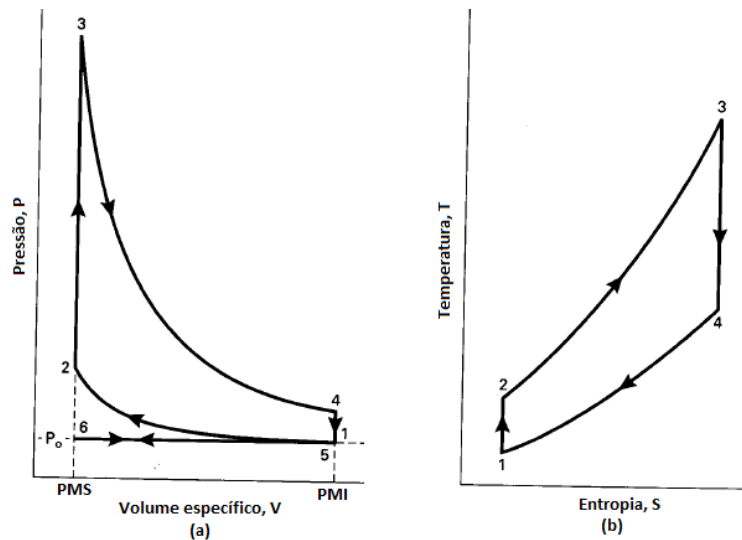


Figura 3.1 - Representação do ciclo ideal para motores Otto: (a) Diagrama PV e (b) Diagrama TS. Fonte: adaptado de (Pulkrabek, 1997)

O curso de compressão é seguido pela entrada de calor de volume constante (processo $2 \rightarrow 3$, Figura 3.1– a), no PMS, aumentando a quantidade de energia do ar dentro do cilindro. Que caracteriza a segunda fase pela introdução de calor a volume constante. Essa etapa substitui o processo de combustão do ciclo real do motor, que ocorre em condições próximas do volume constante. Essa energia aumenta a temperatura do ar para valores altos, como representado no pico de temperatura do ciclo no ponto 3 (Figura 3.1– b).

O terceiro tempo é a fase de expansão isoentropica. A alta pressão das forças na face do pistão devido à alta pressão e entropia dentro do sistema, a força a voltar para o PMI (processo $3 \rightarrow 4$, Figura 3.1– a), produzindo trabalho e potência ao motor. Essa etapa é aproximada com um processo isentrópico no ciclo Otto (processo $3 \rightarrow 4$, Figura 3.1 – b).

Em seguida, ocorre uma redução de pressão de volume constante (processo $4 \rightarrow 5$, Figura 3.1– a). A perda de entalpia é justificada pela rejeição de calor do sistema. A pressão dentro do cilindro fica reduzida para cerca de 1 atm e a temperatura se reduz drasticamente pelo resfriamento da expansão (processo $4 \rightarrow 1$, Figura 3.1– b). O que determina a quarta e última etapa caracterizada pela rejeição de calor a volume constante.

3.1.2 CICLO REAL OU INDICADO PARA MOTORES DE IGNIÇÃO POR CENTELHA

O movimento do pistão dentro dos cilindros entre o PMS e PMI sincronizado com o movimento do conjunto de válvulas determinam os quatro tempos dos motores de combustão interna. Como citado no tópico 3.1.1, os tempos são denominados: admissão, compressão, expansão e exaustão, como ilustra a Figura 3.2.

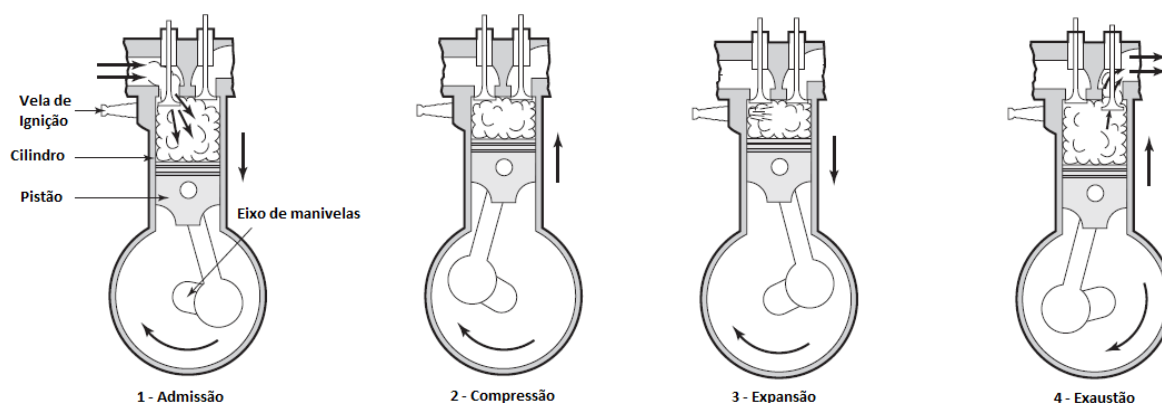


Figura 3.2 - Quatro tempos de um motor de ignição por centelha. Fonte: adaptado de (Ferguson, et al., 2016)

A cada duas voltas no eixo de manivelas, um ciclo completo de trabalho é realizado, passando pelos quatro tempos citados, que são descritos a seguir (Pulkrabek, 1997):

- 1) Admissão: o pistão se movimenta do PMS até o PMI. Nesse momento, a válvula de admissão encontra-se aberta e a de exaustão totalmente fechada. O motor admite ar para dentro do cilindro devido ao diferencial de pressão resultante do deslocamento do pistão. Ao mesmo tempo em que o ar passa pelo sistema de admissão, o combustível é adicionado por meio dos injetores.
- 2) Compressão: as válvulas de admissão e de exaustão se encontram fechadas. O pistão se desloca do PMI ao PMS comprimindo a mistura de ar/combustível, aumentando a pressão e temperatura do sistema. No final da compressão, antes do PMS, o sistema de ignição produz a centelha que provoca a combustão ou queima da mistura.

- 3) Expansão: com as válvulas ainda fechadas, a combustão ocorre num curto espaço de tempo e mudando a composição dos gases dentro do cilindro. Ela provoca também o aumento da temperatura e a pressão no cilindro para seu valor máximo, deslocando do pistão do PMS para PMI. Nesse momento, a energia do combustível é liberada, produzindo o trabalho do ciclo do motor. As pressões dos gases forçam o pistão para baixo, transformando o movimento linear do pistão em movimento rotativo no virabrequim. O *Blowdown* ocorre quando a válvula de escape é aberta um pouco antes de o pistão atingir o PMI. A diferença de pressão dentro do cilindro e a pressão atmosférica fazem com que parte dos gases queimados seja empurrada para fora do cilindro, o que reduz o trabalho de bombeamento. Entretanto, esses gases transportam uma alta quantidade de entalpia, diminuindo a eficiência térmica do ciclo.

- 4) Exaustão: quando o pistão atinge PMI, o *Blowdown* termina e a pressão no cilindro está aproximadamente igual à pressão atmosférica. Com a válvula de escape ainda aberta, grande parte dos gases restantes é empurrada para fora do cilindro graças ao movimento de subida do pistão do PMI ao PMS, restando apenas o volume morto quando o pistão atinge o PMS. No final da exaustão, a válvula de admissão começa a abrir, reiniciando o ciclo. Caso ocorra um período em que tanto a válvula de admissão como a de escape estejam abertas, tal período é denominado sobreposição ou cruzamento de válvulas.

Dessa forma, pode-se associar, de forma sintética, os movimentos das válvulas de admissão e de exaustão com o movimento do pistão a cada um dos tempos do motor. De maneira análoga, o ciclo real ou indicado de um motor de quatro tempos de ignição por centelha pode ser representado pela Figura 3.3:

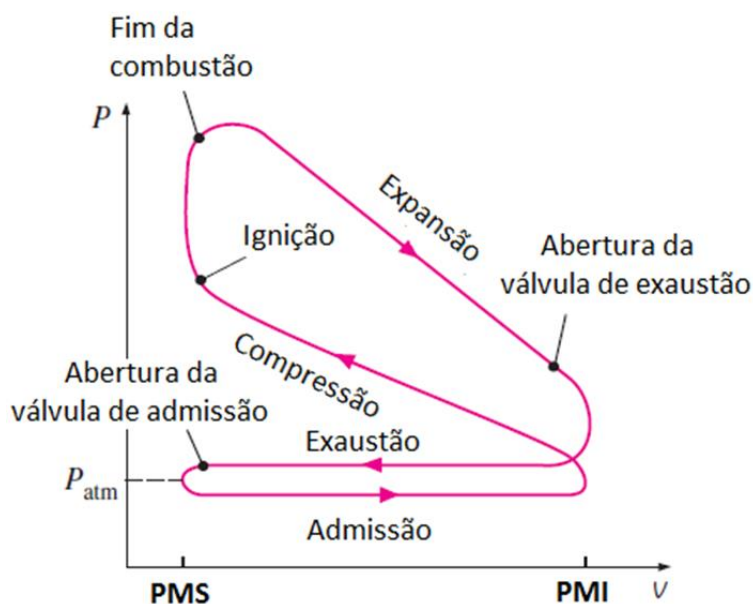


Figura 3.3 - Representação do ciclo real ou indicado. Fonte: adaptado de (Çengel, et al., 2004)

As principais diferenças entre o ciclo teórico e o real, ou seja, as perdas de trabalho útil, se fundamentam principalmente nas perdas de calor, na duração da combustão e nos tempos das válvulas. Essas diferenças são ilustradas na Figura 3.4. Na região A (Figura 3.4), como o cilindro está sendo refrigerado, o que resulta em perdas de calor pelas suas paredes. Assim, em comparação ao ciclo teórico, os tempos de compressão e expansão para o ciclo real não são adiabáticos e sim, politrópicos. Na região B (Figura 3.4), a diferença se justifica pela aproximação do ciclo ideal que a combustão ocorre em volume constante, portanto instantânea. No ciclo real, a combustão demanda um intervalo de tempo representada pela pressão máxima inferior à teórica (Giacosa, 1970).

A região C (Figura 3.4) é devida à suposição de que o calor rejeitado seja retirado instantaneamente no PMI e, no ciclo real, essa perda de calor demanda um tempo relativamente alto. A válvula de escape tem que ser aberta de forma antecipada para que parte dos gases queimados saiam antes que o pistão alcance o PMI. E, por último, a admissão de ar, a pressão interna do cilindro é inferior ao período de expulsão dos gases. Esse esforço do motor para aspirar o ar e expulsar os gases queimados denomina-se trabalho de bombeamento, ilustrada na região D (Brunetti, 2012) (Giacosa, 1970).

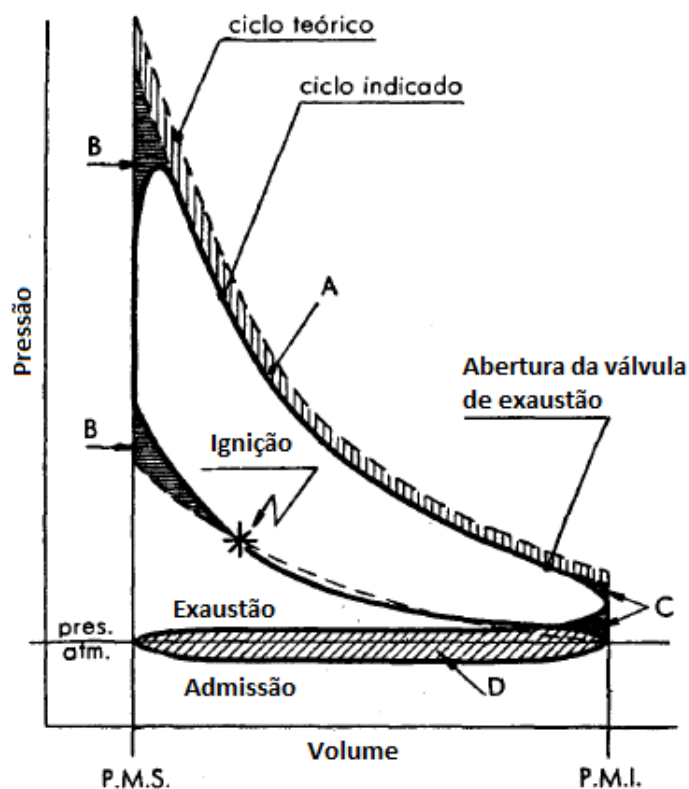


Figura 3.4 – Comparação entre o ciclo teórico e real Otto. Fonte: adaptado de (Giacosa, 1970)

3.1.3 PARÂMETROS DE DESEMPENHO EM MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA

Os parâmetros de desempenho mais relevantes em motores de combustão interna são aqueles relacionados à eficiência, consumo específico de combustível e emissões (Heywood, 1988). A seguir, serão explicados alguns dos parâmetros e termos relevantes a esse trabalho.

3.1.3.1 Razão volumétrica de compressão

Definida pela razão do volume total (quando o pistão se encontra no PMI) e o volume morto (quando o pistão se encontra no PMS), ela representa quantas vezes o volume total é reduzido. O volume morto (V_c) é o volume da câmara quando o pistão se encontra no PMS. O volume total é a soma do volume morto (V_c) e o volume deslocado (V_D). Sendo o volume deslocado (V_D), o volume do deslocamento do pistão do PMS para PMI.

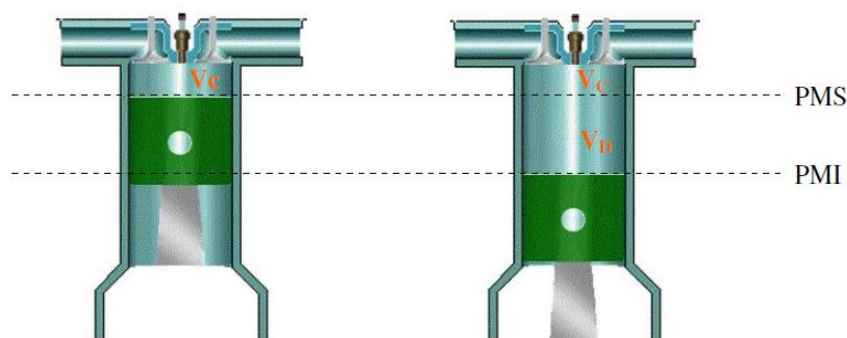


Figura 3.5 – Razão volumétrica de compressão: à esquerda, o pistão está no PMS, representando o volume morto (V_c), e, à direita, o pistão está no PMI, representando o volume total. Fonte: retirado de (Baeta, 2006).

A razão volumétrica de compressão é uma característica construtiva do motor e apresenta grande influência na eficiência térmica. De uma maneira matemática, a razão volumétrica de compressão (r_c) pode ser definida pela Equação 3.1 (Brunetti, 2012):

$$r_c = \frac{V_c + V_D}{V_c} \quad (3.1)$$

3.1.3.2 Coeficiente de descarga das válvulas

A eficiência volumétrica nos motores de combustão interna é afetada pelo coeficiente de descarga das válvulas. Esse coeficiente é definido pela razão entre a quantidade de ar que entrou no cilindro (vazão mássica real) e a quantidade de ar que deveria entrar (vazão mássica teórica). Podendo esse ser calculado pela metodologia proposta por Heywood (Heywood, 1988), considerando um escoamento subsônico:

$$m_{AR} = \frac{CdArPo}{\sqrt{RT_0}} \left(\frac{P}{Po}\right)^{\frac{1}{\gamma}} \left\{ \frac{2}{\gamma - 1} \left[1 - \left(\frac{P}{Po}\right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.2)$$

No qual m_{ar} é a vazão mássica de ar, P é a pressão na restrição (pressão estática na saída), P_o é a pressão de estagnação (pressão total na entrada), T_o é a temperatura de estagnação (temperatura total na entrada), R é a constante real dos gases, γ é a razão

entre os coeficientes de calor específico, a pressão constante e o volume constante, C_d é o coeficiente de descarga das válvulas e A_r é a área de referência.

A área de referência é uma característica do projeto da válvula. Geralmente, utiliza-se a área da cortina, calculada pela Equação 3.3:

$$A_r = \pi D_{val} L_{val} \quad (3.3)$$

em que D_{val} é o diâmetro da válvula e L_{val} é o levante da válvula.

3.1.3.3 Pressão média efetiva

Embora o torque seja uma medida importante para mensurar a capacidade de um motor realizar trabalho, ele é dependente do tamanho do motor. Uma outra medida de desempenho é a razão do trabalho realizado por ciclo do motor pelo volume deslocado no ciclo. Esse parâmetro, que tem unidade de força por área, é denominado pressão média efetiva (MEP - do inglês, *Mean Effective Pressure*), podendo ser calculado como descrito na Equação 3.4 e Equação 3.5 (Heywood, 1988):

$$\text{Trabalho por ciclo} = \frac{P n_r}{N} \quad (3.4)$$

$$mep = \frac{P n_r}{V_D N} \quad (3.5)$$

Sendo P a potência, n_r o número de rotações por ciclo de trabalho, no caso de motores a quatro tempos, esse valor é 2, N o número de revoluções por minuto.

Diferentes pressões médias efetivas podem também ser definidas em função do trabalho realizado, sendo elas: BMEP, IMEP, PMEP e FMEP. O BMEP ou pressão média efetiva de eixo (do inglês, *Break Mean Effective Pressure*) representa a pressão média no tempo de expansão, que produziria o mesmo torque no eixo do motor por ciclo. O IMEP ou Pressão média efetiva indicada (do inglês, *Indicated Mean Effective Pressure*) relaciona a pressão média nos cilindros, que durante o tempo de expansão produziria o mesmo trabalho indicado que a curva de pressão nos cilindros por ciclo. O PMEP ou pressão média efetiva de bombeamento (do inglês, *Pumping Mean Effective*

Pressure) relaciona a transferência de trabalho entre o pistão e os gases do cilindro durante os tempos de admissão. Ele pode assumir valores negativos (Machado, 2012). O IMEP e PMEP se relacionam, como descrito na Equação 3.6, resultando na Pressão média efetiva indicada líquida, NIMEP.

$$\text{NIMEP} = \text{IMEP} - \text{PMEP} \quad (3.6)$$

O FMEP ou pressão média efetiva de fricção (do inglês, *Friction Mean Effective Pressure*) expressa uma pressão média no tempo de expansão, que produziria um trabalho de atrito mecânico equivalente ao produzido durante o ciclo do motor. Ou seja, relaciona as perdas mecânicas, sendo ela também definida como na Equação 3.7:

$$\text{FMEP} = \text{NIMEP} - \text{BMEP} \quad (3.7)$$

3.1.3.4 Fração de massa queimada ou MBF

A taxa em que a mistura ar-combustível queima começa com um valor baixo imediatamente após a centelha elétrica, até seu valor máximo perto da metade do processo de queima e depois decresce até o final da combustão. Dessa forma é conveniente usar as frações de massa queimada (MBF - do inglês, *Mass Burned Fraction*) ou curvas de liberação de calor para caracterizar diferentes estágios do processo de combustão em motores em função do ângulo do eixo de manivela (Heywood, 1988). A Figura 3.6 ilustra uma curva típica da fração de massa queimada.

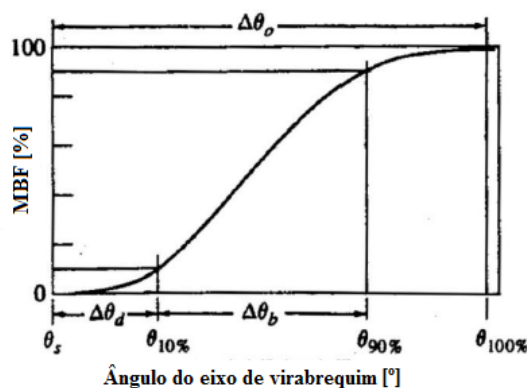


Figura 3.6 – Curva típica da fração de massa queimada. Fonte: adaptado de (Heywood, 1988)

Na Figura 3.6 estão ressaltados três intervalos, $\Delta\theta_d$, $\Delta\theta_b$ e $\Delta\theta_o$, que caracterizam o processo de liberação de energia na combustão, podendo ser definidos como:

- Ângulo de desenvolvimento da chama, $\Delta\theta_d$: representa o intervalo entre o acionamento da centelha (θ_s) e o tempo em que uma pequena quantidade da fração da massa dentro do cilindro é queimada. O mais usual é quantificar 10% da fração mássica queimada ($\theta_{10\%}$), normalmente denominado MBF 10.
- Ângulo de queima rápida: representado pelo intervalo entre o final do desenvolvimento da frente de chama (normalmente quantificado como 10% da fração mássica queimada) e o final do processo de propagação da chama (normalmente quantificado como 90% da fração mássica queimada, $\theta_{90\%}$). É o período necessário para queimar a maior parte da carga do cilindro, normalmente denominado MBF 10-90.
- Ângulo de duração da combustão, $\Delta\theta_o$: representa todo o processo de combustão.

Outro parâmetro importante é o ângulo no qual 50% da carga do cilindro foi queimada, definido com MBF 50.

3.2 COMBUSTÍVEIS

O principal combustível para motores a ignição por centelha é a gasolina, um combustível derivado do petróleo. Entretanto, desde a crise do petróleo em 1970, o mercado de gasolina no Brasil se relaciona com o etanol. Com a criação do Proálcool, ocorreu um estímulo à produção de etanol para substituir a gasolina, possibilitando aos veículos serem abastecidos a etanol. Em complemento, a gasolina consumida no país passou a ser misturada com uma fração de etanol, objetivando a redução de preços e emissões de poluentes (Melo, et al., 2014).

A prática de adição de etanol à gasolina não é exclusiva do Brasil, sendo usada em outras partes do mundo, como a União Europeia, a Tailândia e o Canadá (Masum, et al., 2013). Além do etanol, existem outros combustíveis alternativos aos derivados de petróleo, tais como o metanol, o gás natural, o hidrogênio e o biodiesel (Baeta, 2006). Serão apresentadas somente as características da gasolina e etanol, combustíveis utilizados.

3.2.1 GASOLINA

A gasolina é uma mistura de hidrocarbonetos derivados do petróleo. Composto basicamente de carbono, hidrogênio (combinado de várias maneiras) e vestígios de outras espécies, o petróleo bruto pode apresentar mais de 25000 diferentes hidrocarbonetos. Em peso, ele apresenta de 83% a 87% de carbono e de 11% a 14% de hidrogênio (Pulkrabek, 1997).

O petróleo é resultado de transformações durante milhares de anos de matéria orgânica acumulada sob condições específicas de pressão e isolamento em camadas do subsolo de bacias sedimentares. Inicialmente, o petróleo é destilado, separando diferentes cadeias de hidrocarbonetos de acordo com as faixas de temperatura e pressão. Em seguida, ele é processado quimicamente para atender as necessidades do mercado pelo refinamento. O processo de refino pode ocorrer de várias maneiras, no qual se extrai subprodutos, dentre eles, os mais comuns são (ANP, 2018):

- Craqueamento: gera como produto cadeias menores de hidrocarbonetos pela divisão de grandes cadeias;
- Reforma: gera como produto cadeias maiores de hidrocarbonetos pela combinação de cadeias menores;
- Alquilação: gera como produto hidrocarbonetos desejados pelo rearranjo de cadeias;
- Extração de aromáticos: gera produtos para a indústria química e petroquímica pela extração de naftas aromáticos leves;
- Hidrotratamento: gera como produto a gasolina e o diesel pelo tratamento catalítico com hidrogênio as frações leves e médias.

A gasolina é uma mistura de hidrocarbonetos voláteis que podem variar de 5 a 12 carbonos. Esses hidrocarbonetos podem ser agregados em famílias, sendo as três principais presentes na gasolina (Pulkrabek, 1997) (Sarathy, et al., 2018):

- **Parafinas (Alcanos):** são hidrocarbonetos formados apenas por ligações simples entre seus átomos de carbono, possuem cadeia aberta (acíclicos) e ligações simples (saturadas) e são representados pela fórmula química C_nH_{2n+2} . As mais comuns presentes na gasolina são n- e iso-pentano, isômeros de hexano, heptano e octano com alguns grupos metil como radical. O número de octano aumenta com o aumento do grau de substituições do radical metila. As parafinas de elevado peso molecular (C_7 - C_8) apresentam tipicamente de uma a três substituições do radical metila. As parafinas de baixo peso molecular, tais como n-butanos e isobutanos, são misturadas na gasolina para atender aos requisitos de destilação inicial para partida a frio sob condições de inverno.
- **Olefinas (Alcenos):** são hidrocarbonetos que apresentam uma ligação dupla entre seus átomos de carbono. Eles são também acíclicos e insaturados, representados pela fórmula química C_nH_{2n} . As olefinas típicas variam de 5 a 8 carbonos, como os isômeros de penteno e hexeno, lineares e ramificados. Devido à presença de ligações duplas na estrutura molecular, elas possuem altos índice de octano. São encontradas em quantidades limitadas devido à sua fraca estabilidade oxidativa, o que reduz o tempo de armazenamento dos combustíveis da gasolina. Além de serem precursores para outros produtos químicos adicionados à gasolina.
- **Aromáticos:** são hidrocarbonetos que apresentam um ou mais anéis aromáticos na sua molécula, ou seja, alternam ligações simples e duplas entre os carbonos, formando uma ressonância em uma cadeia fechada, portanto cíclica. São representados pela fórmula geral C_nH_{2n-6} . Apresentam o maior peso molecular dentre os combustíveis da gasolina, têm altos números de octano. Entretanto, sua presença é limitada a menos de 30 a 35% em volume, devido à sua propensão a aumentar as emissões de particulados, sendo o benzeno limitado a menos de 1% em volume por ser um agente cancerígeno. O tolueno é o aromático mais

predominante encontrado na gasolina, sendo outros representantes o etilbenzeno e vários isômeros de trimetilbenzeno.

A gasolina pode ainda conter a adição de outros compostos com finalidades específicas, como por exemplo antioxidantes, detergentes, anticongelantes, desativadores de metal, corantes, além do etanol, que aumenta a octanagem do combustível. Independentemente da composição final da gasolina, espera-se que ela apresente algumas características para seu uso em motores de combustão interna, tais como (Luz, 2003):

- O combustível se vaporize suficientemente na câmara de combustão, principalmente com o motor frio. Ao mesmo tempo, é desejável que não ocorra uma vaporização excessiva de combustível antes da injeção.
- A queima do combustível ocorra com o mínimo de formação de resíduos, para uma maior eficiência de queima, além de diminuir a formação de depósitos que podem levar à oxidação, entupimentos e comprometimentos de peças do motor. A combustão deve ocorrer após o acionamento da centelha, sem detonação.
- A gasolina não deve ser corrosiva, oferecendo segurança, apresentando baixo teor de produtos tóxicos e que não forme uma quantidade excessiva de poluentes.

3.2.2 ETANOL

Em 2016, o Brasil produziu 28.692,67 milhões de m³ de etanol anidro e hidratado, sendo o segundo maior produtor mundial. Desse valor, 11,7 milhões corresponde ao etanol anidro, cuja principal utilização é ser adicionado à gasolina A (aquela produzida nas refinarias) para a formulação da gasolina C (presente no mercado de distribuição). Desde 16 de março de 2015, essa adição representa 27% do volume total da gasolina (ANP, 2017).

Diferentemente dos Estados Unidos, cuja produção do etanol é derivada do milho, o Brasil é o segundo maior produtor de álcool combustível, sendo a sua matéria-

prima a cana-de-açúcar. Uma usina típica de produção de açúcar ou uma destilaria de etanol é composta pelos mesmos processos iniciais: recebimento da cana-de-açúcar, preparo da cana e extração do caldo. A cana-de-açúcar precisa ser esmagada logo após a colheita para evitar perdas causadas por contaminação microbiana. O caldo extraído é tratado, no qual as impurezas são removidas para fornecer a matéria prima adequada para as etapas subsequentes. Uma vez eliminada as impurezas, esse caldo é misturado a um melão e iniciada a etapa de fermentação (de Souza Dias, et al., 2015).

As destilarias brasileiras usam um processo de fermentação aperfeiçoado a base de leveduras, sendo ele patenteado em 1937 por Firmino Boinot, da região de Melle, França. Depois do final de cada fermentação, o vinho cru é centrifugado para separar as células de levedura em um creme concentrado enquanto o vinho é destilado. Após um tratamento com ácido sulfúrico diluído em água (pH 2,0–2,5 por 1 a 2 h), essas células de levedura retornam a tanques de grande volume (250–3000 L) para um novo ciclo de fermentação. Uma vez que os processos de reciclagem começam com concentrações celulares mais altas (8–12%, v/v), os tempos de fermentação das brasileiras são mais rápidos (6–12 h) quando comparados às fermentações nos EUA (54–72 h) sem reciclagem de células de levedura (Lopes, et al., 2016) (Basso, et al., 2008).

Essa alta concentração celular de levedura leva a altos níveis de rendimento de etanol, com uma conversão de 90-92% do açúcar em etanol (Basso, et al., 2008). O produto de fermentação contendo etanol é enviado para destilação e desidratação. A Figura 3.7 ilustra o ciclo de vida da produção de etanol. Quando se utiliza o etanol combustível como substituto a outros de origem fóssil, a redução de gases do efeito estufa na produção e combustão é de 66% (Meneguetti, et al., 2010).

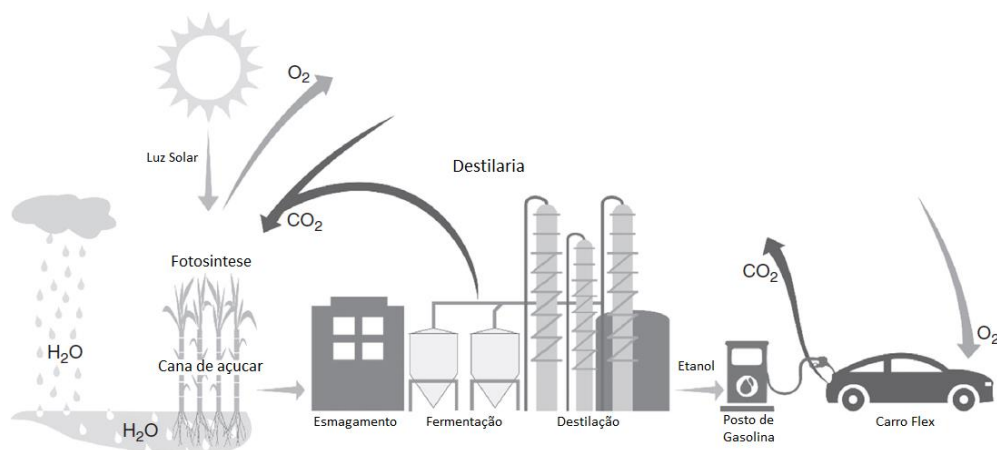


Figura 3.7 - Ciclo de vida da produção de etanol, o dióxido de carbono emitido da queima de etanol é consumido através da fotossíntese da cana-de-açúcar. Fonte: adaptado de (Lopes, et al., 2016).

O etanol é um composto químico pertencente à família dos álcoois, ou seja, ele é uma substância orgânica que contém um grupo hidroxila (OH) ligado diretamente a um átomo de carbono saturado. Sua fórmula química básica é C_2H_5OH e ele também é conhecido popularmente como álcool etílico. Dessa forma, além de ser um combustível renovável, podendo ser obtido de diversas fontes, o etanol apresenta as seguintes vantagens (Pulkrabek, 1997):

- Apresenta alta octanagem possibilitando o uso de razões volumétricas de compressão mais elevadas sem a ocorrência de detonação.
- Apresenta índice de emissões globais inferior ao da gasolina.
- Forma mais mols de produtos por mol de combustível queimado quando comparado à gasolina, o que resulta numa maior pressão desses gases queimados.
- Possui alto resfriamento evaporativo, o que resulta na redução da temperatura dos gases nos tempos de admissão e compressão. Isso aumenta a eficiência volumétrica do motor e reduz o trabalho necessário no tempo de compressão.
- Possui baixo teor de enxofre no combustível.

De maneira análoga, podemos citar as principais desvantagens do etanol como combustível para motores de ignição por centelha (Pulkrabek, 1997):

- O baixo conteúdo energético do combustível, isso significa que quase duas vezes mais álcool do que gasolina deve ser queimado para gerar a mesma energia para o motor. Por outro lado, o álcool contém oxigênio e, portanto, requer uma quantidade menor do ar para uma queima estequiométrica, ou seja, mais combustível pode ser queimado com a mesma quantidade de ar.
- Aumentam as emissões de aldeídos. Se o álcool combustível substituísse toda a gasolina consumida atualmente, as emissões de aldeídos seriam um grave problema de poluição dos gases de exaustão.
- O álcool é muito mais corrosivo do que a gasolina em cobre, latão, alumínio, borracha e muitos plásticos. Isso coloca algumas restrições na escolha de materiais e fabricação de motores a serem utilizados com esse combustível.
- Motores movidos a álcool geralmente têm dificuldade em dar partida em temperaturas abaixo de 10 ° C, isso ocorre devido à baixa pressão de vapor e evaporação do etanol. Muitas vezes, uma pequena quantidade de gasolina é adicionada ao álcool combustível, o que melhora bastante a partida em clima frio. A necessidade de fazer isso, no entanto, reduz muito a atratividade de qualquer combustível alternativo.

3.2.3 ÍNDICE DE OCTANO E CARACTERÍSTICAS DA GASOLINA E DO ETANOL

O índice de octano avalia a capacidade que um combustível apresenta de resistir à compressão sem entrar em autoignição (queima espontânea da mistura). Dessa forma, se um combustível possui baixo índice de octanagem, ele sofre combustão prematura pela simples compressão. De maneira análoga, um combustível com elevado índice de octano é resistente à compressão.

Existem dois métodos para medir a sensibilidade do combustível à compressão, o RON, número de octano pesquisa (do inglês, *Research Octano Number*) determinado

pela norma ASTM D2699 (ASTM, 1999), e o MON, número de octanas motor (do inglês, *Motor Octane Number*) determinado pela norma ASTM D2700 (ASTM, 2009). O RON avalia a resistência do combustível quando o motor está operando em condições suaves (temperatura da mistura e velocidades relativamente baixas). O MON avalia a resistência do combustível quando o motor está operando em condições severas. Na Tabela 3.1 são apresentados os valores típicos de RON e MON para a gasolina e para o etanol, como também outras propriedades desses combustíveis.

Tabela 3.1 – Propriedades da Gasolina e Etanol

Propriedade	Unidade	Gasolina	Etanol	Ref.
Fórmula	-	C4 a C12	C ₂ H ₅ OH	(da Silva, 2008)
Peso molecular	g mol ⁻¹	100 - 105	46	(da Silva, 2008)
Ar/Combustível	$\lambda = 1$	14,7	9,0	(da Silva, 2008) (Pujatti, 2007)
Massa específica a 20°C Seria densidade relativa??	-	0,72 – 0,78	0,794	(da Silva, 2008)
Densidade a 15°C. Seria massa específica??	kg m ⁻³	750 - 765	785 - 809,9	(Masum, et al., 2013)
Composição				
Carbono	% massa	85 - 88	52,2	(da Silva, 2008)
Hidrogênio	% massa	12 - 15	13,1	(da Silva, 2008)
Oxigênio	% massa	0	34,7	(da Silva, 2008)
RON	-	91-100	106-110	(Bayraktar, 2005) (Awada, et al., 2018)
MON	-	82 – 92	92	(Masum, et al., 2013) (Awada, et al., 2018)
LHV	MJ kg ⁻¹	44	27	(Bayraktar, 2005)
HHV	MJ kg ⁻¹	47,3	29,7	(Masum, et al., 2013)
Calor latente de vaporização	kJ kg ⁻¹	380 - 400	900 - 920	(Masum, et al., 2013)
Temperatura de congelamento	°C	-40	-114	(Masum, et al., 2013) (Awada, et al., 2018)
Temperatura de ebulição	°C	27 - 225	78	(Masum, et al., 2013) (Awada, et al., 2018)
Temperatura de autoignição	°C	257	425	(Masum, et al., 2013) (Awada, et al., 2018)
Velocidade laminar de chama a 100kPa, 325k	cm/s	~33	~39	(Masum, et al., 2013)
Destilação				

(a) iniciada ebulição	%	45	78	(Masum, et al., 2013)
(b) 10	%	54	78	(Masum, et al., 2013)
(c) 50	%	96	78	(Masum, et al., 2013)
(d) 90	%	168	79	(Masum, et al., 2013)
(e) Fim da ebulição	%	207	79	(Masum, et al., 2013)

3.3 FORMAÇÃO DA MISTURA AR-COMBUSTÍVEL

O sistema de injeção de combustível tem como função disponibilizar a quantidade de combustível adequada para a formação da mistura ar-combustível melhor adaptada a um determinado regime de operação do motor. Ele impacta numa queima eficiente, melhor consumo de combustível, torque e nos níveis de emissões de poluentes (Rodrigues Filho, 2014).

A alimentação de combustível atual é proveniente de sistemas eletrônicos de injeção. Os sistemas de injeção de combustível podem ser classificados quanto à sua topologia, injeção dentro da câmara de combustão ou fora dela. Caso a injeção ocorra fora da câmara de combustão, o combustível é injetado na porta de entrada de cada cilindro, denominada PFI (do inglês, *Port Fuel Injection*). Caso contrário, o combustível é injetado diretamente na câmara de combustão, denomina-se, então, injeção direta (do inglês, *Direct Injection –DI*).

3.3.1 INJEÇÃO DIRETA DE COMBUSTÍVEL

A principal diferença entre os sistemas PFI e o DI está nas estratégias de preparação da mistura. No motor com PFI, o combustível é injetado no pórtico de admissão de cada cilindro. Na maioria dos motores, a injeção de combustível ocorre no assento da válvula de admissão enquanto a válvula ainda está fechada. Durante a partida a frio, um filme transitório ou poça de combustível líquido se forma na válvula de admissão, o que causa um atraso na entrega do combustível e um erro associado à vaporização parcial do mesmo, podendo causar no motor uma falha de ignição ou experimentar uma queima parcial nos primeiros instantes (Zhao, et al., 1999).

O sistema DI, como mostra a Figura 3.8, injeta combustível diretamente no cilindro do motor, evitando os problemas associados ao umedecimento da parede dos dutos de admissão, permite um controle aprimorado da massa de combustível admitida,

bem como uma redução no tempo de transporte de combustível. Esse sistema possibilita o uso de queimas mais pobres, maior precisão no cálculo da massa de combustível a ser injetada e conseqüentemente uma menor variação cíclica da mistura ar-combustível (Brunetti, 2012)

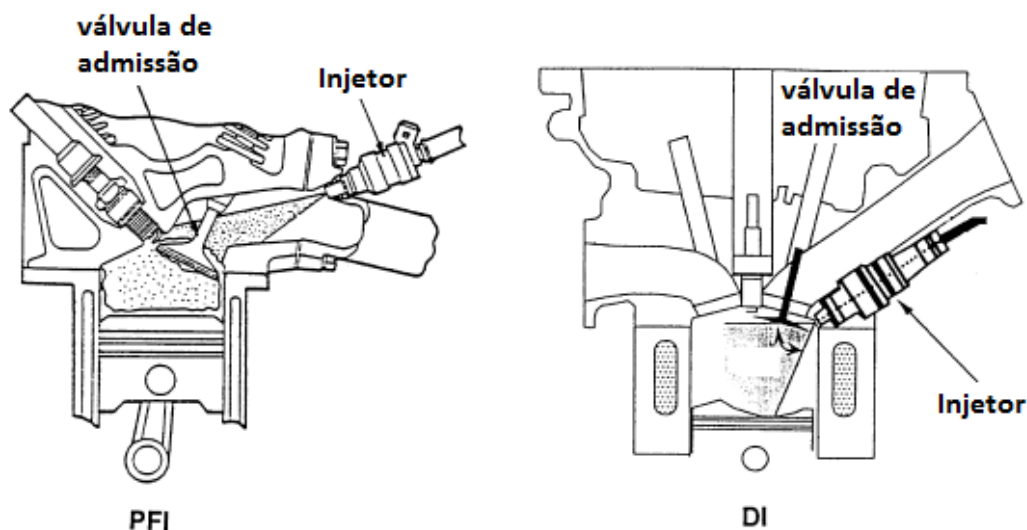


Figura 3.8 – Sistemas de injeção de combustível. Fonte: adaptado de (Zhao, et al., 1999)

O sistema DI possibilita também maiores pressões de injeção, assim o combustível injetado no cilindro é muito melhor atomizado do que o do sistema PFI, particularmente sob condições operacionais frias, produzindo assim maiores taxas de vaporização de combustível. É importante notar, no entanto, que a injeção de combustível diretamente no cilindro não é uma garantia de que problemas de filme líquido de combustível não estejam presentes, pode ocorrer ainda o molhamento da coroa do pistão ou outras superfícies de câmaras de combustão (Zhao, et al., 1999).

Os injetores consistem basicamente de uma válvula, uma mola, ponta do injetor e o corpo. A ponta do injetor possui um papel fundamental na forma do *spray* de combustível. Quando o combustível é forçado a escoar através dos orifícios da ponta do injetor, ele se quebra em gotas menores, sendo atomizado. Os principais injetores são: multi-furos, de abertura externa e *pressure swirl*. A descrição deles é apresentada a seguir (Zhao, et al., 1999) (Baumgarten, 2006):

- **Multi-furos:** caracterizados pela formação de *sprays* compactos e heterogêneos, constituídos por zonas ricas e pobres em combustível. Uma grande vantagem é que a estrutura e ângulo de cone não se alteram muito com o aumento da contrapressão da câmara, como pode ser visto na Figura 3.9. Esse injetor é muito aplicado em motores a diesel com alta pressão de injeção.
- **Pressure Swirl:** caracterizado pela formação de um pré-jato de combustível e um *spray* de cone oco. O ângulo do cone formado pelo *spray* é extremamente influenciado pela contrapressão da câmara, como pode ser visto na Figura 3.9. A principal vantagem do *spray* de cone oco é o aumento da relação área-volume, que leva à atomização do combustível sem grandes penetrações do mesmo.
- **Abertura externa:** caracterizado pela formação de *spray* de cone oco uniforme, mas sem a geração de um pré-jato (pré-*spray*), como no *Pressure Swirl*. Em contrapartida, eles apresentam uma penetração de combustível, para as mesmas condições, inferior ao Multi-furos. A contrapressão da câmara influencia menos no perfil do *spray*, como pode ser visto na Figura 3.9.

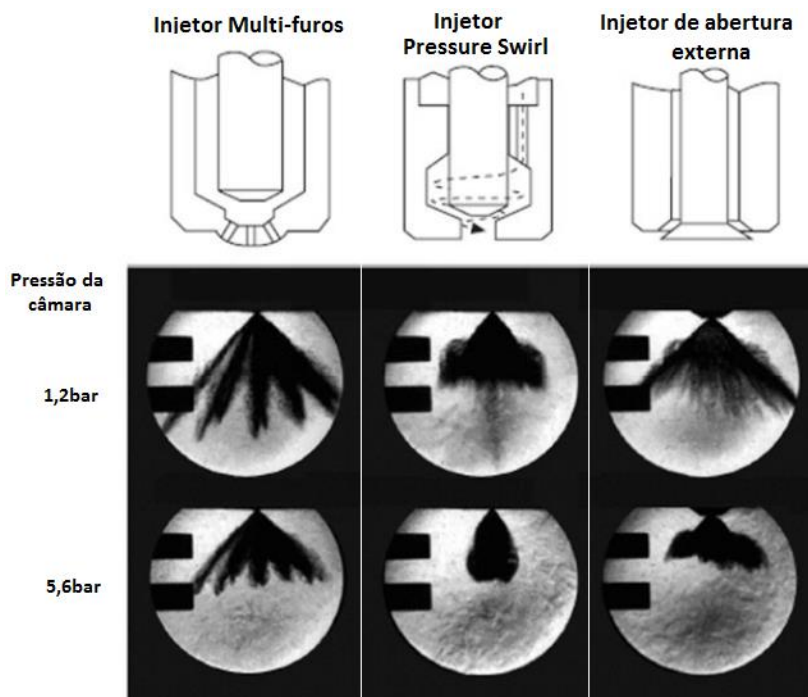


Figura 3.9 - Tipos de injetores e o efeito da pressão sobre a estrutura do spray.

Fonte: adaptado de (Zhao, et al., 1999)

3.3.2 MOVIMENTO DE CARGA DENTRO DO CILINDRO

A geometria do coletor de admissão e de escape, a geometria da câmara de combustão e a velocidade de rotação do motor influenciam diretamente nos processos de admissão e expulsão dos gases. O escoamento da mistura ar-combustível interage com as paredes do cilindro e com o pistão, criando circulações de grande escala dentro do cilindro. Essas grandes circulações distribuem a energia cinética turbulenta e atuam diretamente na formação e homogeneidade da carga, garantindo que suas condições de queima sejam como as previstas no projeto, ou seja, são essenciais para uma boa combustão (Rech, 2010).

Dessa maneira, por apresentarem uma natureza rotacional, alguns desses movimentos da massa gasosa podem ser classificados baseados em alguns padrões de escoamento em função do plano em que são avaliados, tais como: *Swirl*, *Tumble* e *Cross-Tumble*. Esses três movimentos podem ocorrer simultaneamente no motor e são independentes entre si.

O *swirl* se define como uma corrente circular num movimento horizontal ao redor do centro de massa. Como ilustrado pela Figura 3.10, ele é uma rotação em torno do eixo Z, em direção axial ao cilindro.

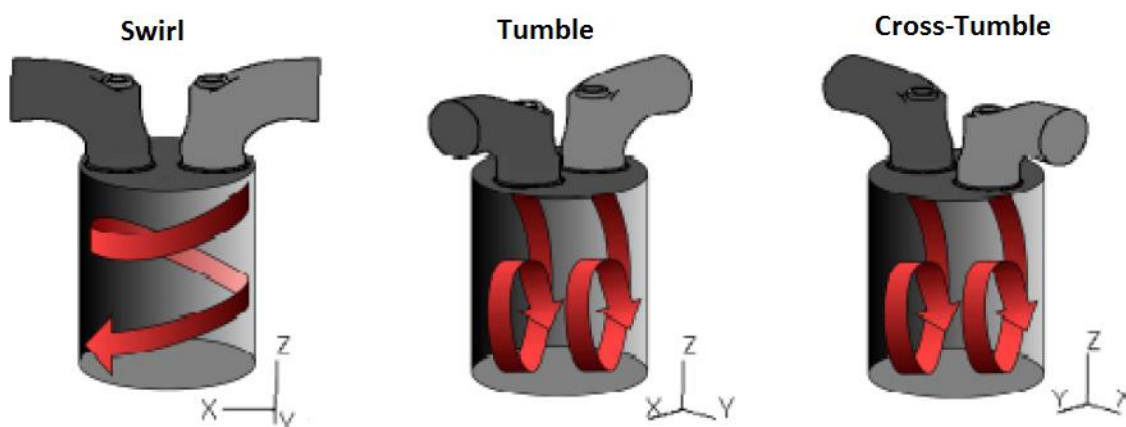


Figura 3.10 - Movimentos horizontais e verticais da carga do cilindro. Fonte: adaptado de (Rech, 2010)

Já o *tumble* e *cross-tumble* quantificam o escoamento circular num movimento vertical. Em outras palavras, são as rotações na direção radial do cilindro, sendo que o *Tumble* é um movimento no plano X-Z em torno do eixo y. Ele também pode ser

definido como a vorticidade perpendicular ao eixo do *swirl* e paralelo ao eixo das válvulas. Entretanto, seu eixo de rotação é variável, movendo-se juntamente com o movimento do pistão. Dessa maneira, seu movimento é comprimido durante a fase de compressão, sendo praticamente dissipado antes do fim da mesma. A sua dissipação causa perda de energia ao escoamento, não mantendo a energia cinética do cilindro (Marques Ribeiro, 2014). O *Cross-tumble*, como anteriormente citado, apresenta o mesmo princípio e natureza do *Tumble*, sendo um movimento no plano Y-Z em torno do eixo x.

Outro movimento importante é o *Squish*, nome dado ao movimento de gás radialmente para dentro ou transversal que ocorre no final do curso de compressão quando a coroa do pistão ou suas elevações se aproximam do topo da câmara de combustão (Heywood, 1988).

A forma da câmara de combustão e da coroa do pistão definem diretamente esse movimento. O *squish* muitas vezes pode ser definido pela porcentagem de esmagar, ou seja, a área que se estreita quando o pistão se aproxima da cabeça do cilindro. Essa pode ser ilustrada pela Figura 3.11:

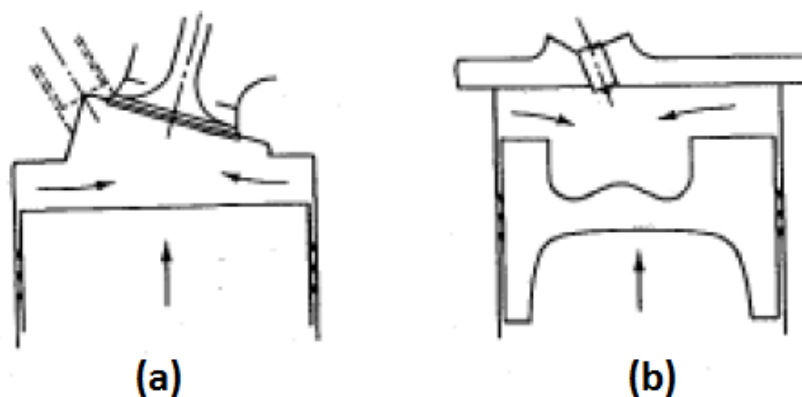


Figura 3.11 - Esquema da maneira que o pistão gera *squish* (a) câmara de combustão em cunha e pistão reto; (b) câmara reta com o pistão com *bowl*. Fonte: adaptado de (Heywood, 1988)

Cerca de 10° antes do PMS ocorre a velocidade máxima que o *squish* pode apresentar. E após o PMS, essa velocidade é negativa, ocorrendo um movimento inverso. Cabe ressaltar que os efeitos desse jato direcionado são pequenos, entretanto a reversão do *squish* aumenta a magnitude da expansão dos gases durante a combustão.

3.3.3 COMPOSIÇÃO DA MISTURA AR-COMBUSTÍVEL

A determinação da relação ar-combustível está diretamente ligada no desempenho do motor, no consumo específico e nas emissões de gases poluentes. Uma mistura de ar e combustível é considerada estequiométrica se a quantidade de oxidante, nesse caso de oxigênio molecular, presente na massa de ar admitida no cilindro for suficiente para queimar completamente a quantidade presente de combustível. Dessa forma, a relação ar/combustível (A/F) é dada pela Equação 3.8, onde \dot{m}_{ar} é a massa ou vazão mássica de ar e \dot{m}_{comb} é a massa ou vazão mássica de combustível.

$$(A/F) = \left(\frac{\dot{m}_{ar}}{\dot{m}_{comb}} \right) \quad (3.8)$$

A relação ar/combustível estequiométrica varia de acordo com o combustível utilizado, sendo para a gasolina pura uma razão de 14:1, o etanol anidro de 9,0:1 e a gasolina E22 de 13,2:1 (Pujatti, 2007). Como na realidade o motor não opera com a relação estequiométrica de ar/combustível, foi escolhido o coeficiente de ar ou fator λ (Lambda) para quantificar o quanto a mistura ar-combustível efetivamente disponível desvia da teoricamente necessária (Bosh, 2005). O inverso do coeficiente de ar é conhecido como razão de equivalência Φ , que podem ser descritos pela Equação 3.9.

$$\lambda = \Phi^{-1} = \frac{(A/F)_{real}}{(A/F)_{estequimétrico}} \quad (3.9)$$

Assim, a formação da mistura em relação à quantidade de ar e combustível admitidos podem ser classificados de três formas:

- Mistura rica: $\lambda < 1$, $\Phi > 1$, ou seja, predomina a falta de ar admitido, então a mistura está rica em combustível.
- Mistura estequiométrica: $\lambda = 1$, $\Phi = 1$, ou seja, a massa de ar admitida corresponde à teoricamente necessária.

- Mistura pobre: $\lambda > 1$, $\Phi < 1$, ou seja, predomina o excesso de ar admitido, então a mistura está pobre em combustível.

Entretanto, quantificar a composição média de ar e combustível não é suficiente quando se analisa a combustão dos mesmos. A homogeneização dessa mistura também é relevante. Basicamente, existem dois modos principais de operação, o primeiro é a operação com a carga homogênea. Nele a injeção de combustível ocorre durante a admissão do ar; dessa forma, o combustível tem tempo suficiente, somado à estrutura e escoamento dentro do cilindro, para que ocorra uma mistura completa entre o combustível e o ar. A mistura é estequiométrica, ou seja, $\lambda = 1$, porém podem ocorrer algumas diferenças em pontos locais da mistura.

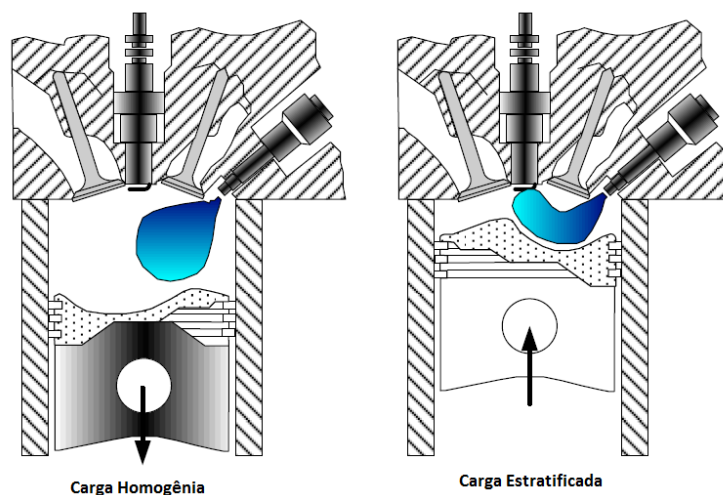


Figura 3.12 - Tipos de operação: Carga homogênea e Carga Estratificada. Fonte: adaptado de (Çelik, et al., 2010)

O segundo modo de operação é com a carga estratificada, a Figura 3.12 ilustra os dois modos de operação. Na operação com a carga estratificada, a injeção de combustível ocorre durante o tempo de compressão. Isso significa que a quantidade de combustível varia em diferentes pontos da carga, não correspondendo localmente à quantidade estequiométrica ajustada. Assim, apenas parte da quantidade total de ar interage com o combustível injetado e este, direcionado para a vela de ignição. O resto do ar fresco envolve a carga estratificada. Esse tipo de operação traz alguns efeitos, como o maior resfriamento da mistura e, assim, a redução da tendência à detonação, a possibilidade do aumento da razão volumétrica de compressão e o grande potencial para a redução do consumo de combustível (Bosh, 2005).

Na operação estratificada, existem três maneiras diferentes de como o combustível é transportado para a região da vela de ignição, que são diretamente relacionadas com a estrutura do escoamento, o posicionamento do injetor, o posicionamento da vela de ignição e a geometria interna da câmara de combustão, em especial, o pistão. Elas são denominadas como *spray guided* (direcionado pela vela), *wall guided* (direcionado pela parede) e *air guided* (arrastado por ar), ilustradas na Figura 3.13:

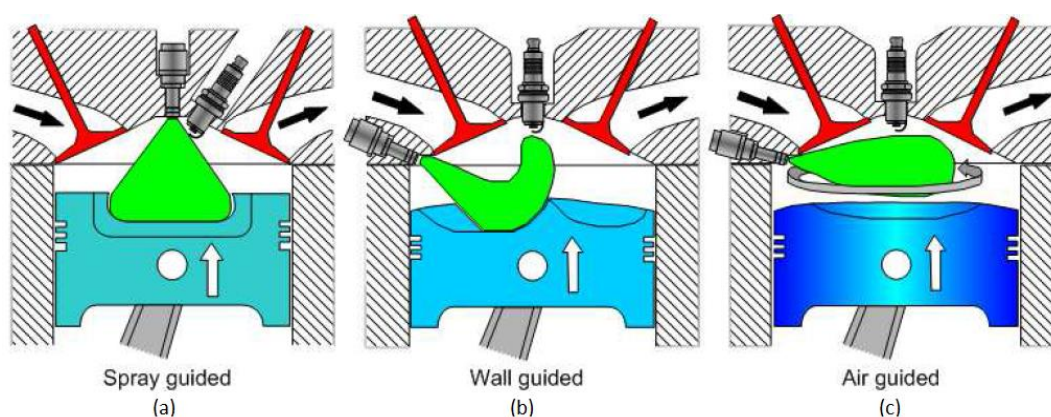


Figura 3.13 - Sistemas de preparação da mistura estratificada para DI: (a) direcionado a vela – *spray guided*; (b) direcionado a parede – *wall guided*; (c) arrastado por ar – *air guided*. Fonte: adaptado de (Çelik, et al., 2010).

- *Spray guided* (direcionado a vela): o injetor se localiza no centro câmara de combustão e injeta verticalmente para baixo o combustível. Ao lado do injetor, encontra-se a vela de ignição. O combustível não é desviado e entra em combustão logo após sua injeção (Bosh, 2005). Essa composição dispensa composições de câmara de combustão e de coroa de pistão complexas. O movimento de carga no cilindro também é de importância secundária, visto que o tempo de preparação da mistura é muito curto, sendo independente do direcionamento do escoamento de ar. Outra vantagem é a não ocorrência no molhamento das paredes internas da câmara de combustão, diminuindo as perdas térmicas. Ele apresenta o maior potencial para a economia do combustível, porém exige altas pressões de injeção e apresenta problemas de precisão e reprodutibilidade em alguns pontos de operação do motor. Um

pequeno deslocamento na forma do spray pode levar à ocorrência de *misfiring* ou deposição de combustível na vela de ignição (Baumgarten, 2006).

- *Wall guided* (direcionado a parede): o injetor se localiza lateralmente na câmara de combustão e, através de uma cavidade na coroa do pistão, o combustível injetado é direcionado para a vela de ignição. A formação da mistura ar-combustível ocorre no caminho da ponta do injetor para a vela (Bosh, 2005). Como o combustível molha a superfície do pistão, ele não consegue evaporar completamente, o que eleva as emissões de hidrocarbonetos não queimados (HC) e de monóxido de carbono, reduzindo o potencial para a economia de combustível. Apesar de ter um conceito robusto e prevenir o *misfiring*, atualmente usa-se uma combinação do *Wall guided* e *Air guided* (Baumgarten, 2006).
- *Air guided* (arrastado por ar): a princípio, ele é semelhante ao *Wall guided*, a principal diferença é que o combustível não interage diretamente com a superfície da coroa do pistão, e sim com um colchão de ar que move a carga (Bosh, 2005). O movimento de carga dentro do cilindro que direciona o combustível injetado em direção à vela de ignição, sem a ocorrência da umidificação das paredes internas da câmara de combustão. Dois movimentos de carga são importantes: o *Swirl* e o *Tumble*. E dessa forma a geometria da coroa de pistão possui um papel importante para reforçar esses movimentos de carga, como mostra a Figura 3.14. O processo de combustão não é muito estável devido à dificuldade de reprodutibilidade em todos os pontos de operação do motor, o *Swirl* e o *Tumble* aumentam as perdas por bombeamento, entretanto o consumo específico de combustível pode ser significativamente reduzido. Assim, a combinação do *Wall guided* e do *Air guided* é o único conceito que permite a formação estável da carga estratificada para a produção em série (Baumgarten, 2006).

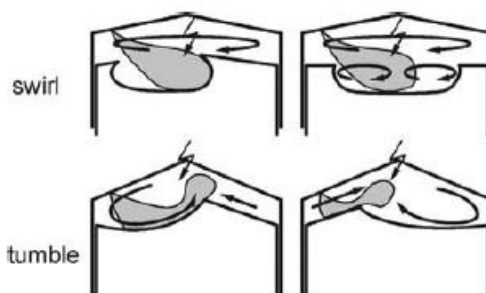


Figura 3.14 – Geometria da coroa do pistão e movimentação de carga no cilindro para o *Air guided*. Fonte: adaptado de (Baumgarten, 2006).

Em complemento à maneira que o combustível é transportado para a região da vela de admissão, a divisão da injeção (do inglês, *Split-injection*) é outra estratégia de estratificação da mistura ar-combustível. A injeção ocorre em duas ou mais etapas. No caso de duas etapas, por exemplo, a primeira ocorre durante a admissão de ar, como na geração de carga homogênea, e a segunda ocorre na compressão da mistura, o usual para geração da carga estratificada. Como o espaço de tempo é curto na segunda injeção, o combustível não se mistura completamente, estratificando também a carga (Vieira da Silva, 2017).

3.4 ASPECTOS GERAIS DA COMBUSTÃO

Após a formação da mistura, homogênea ou estratificada, no final do tempo de compressão, ou seja, um pouco antes do PMS, a vela de ignição é acionada, dando início ao processo de combustão. Para que o processo de ignição ocorra sem falhas, a composição da mistura não pode estar extremamente rica e nem extremamente pobre próximo à região da vela, com um λ local de $0,8 \leq \lambda \leq 1,2$ para operações em motores. A centelha elétrica gerada pela vela eleva a temperatura entre 3000°C e 6000°C, caso contrário, se a energia de ignição for pequena, a combustão não ocorrerá, exceto na pequena porção em contato direto com a centelha elétrica (van Basshuysen, et al., 2004).

Diferentemente do modelamento teórico, a combustão não é instantânea, demandando um intervalo de tempo. O atraso de ignição (do inglês, *ignition delay*),

como é chamado o tempo entre o momento da centelha elétrica e o início da combustão, dura aproximadamente 1ms para combustíveis líquidos (van Basshuysen, et al., 2004).

O momento em que ocorre o acionamento da centelha elétrica de ignição deve ser controlado com precisão. Caso a ignição ocorra tarde demais, o aumento da pressão ocorre de forma tardia e menos intensa, reduzindo o trabalho útil. Além disso, existe o risco de que a combustão esteja incompleta antes da abertura da válvula de exaustão, o que pode levar ao sobreaquecimento do sistema de descarga, danificando componentes do motor. Por outro lado, se a ignição ocorrer muito cedo, a pressão no cilindro irá se elevar excessivamente antes do final do curso de compressão, reduzindo a potência. Assim, o aumento do trabalho para comprimir os gases será maior do que o aumento do trabalho realizado no pistão durante o tempo de expansão (Stone, 1999).

Além disso, com ignição muito antecipada, a elevação da pressão e da temperatura podem ser suficientes para causar detonação, sendo um tipo de combustão anormal. Dessa forma, o momento da ignição é otimizado entre essas duas situações para alcançar a potência máxima. Conhecido pela sigla MBT, que significa o mínimo avanço para o melhor torque (do inglês, *minimum spark advance for the best torque* ou *maximum break torque*) (Stone, 1999) (Baeta, 2006). De forma empírica, o avanço de ignição está em MBT quando 50% da fração de massa queimada ocorrer entre 8 e 10° CA e o pico de pressão estiver por volta de 13 a 15° CA (Heywood, 1988).

3.4.1 DESENVOLVIMENTO DA COMBUSTÃO

A combustão é classificada como normal quando a chama se espalha gradualmente do ponto em que a ignição ocorreu até o extremo da câmara de combustão, sem mudanças abruptas de velocidade. Ela pode ser dividida em três fases: incubação ou fase de desenvolvimento da chama, combustão turbulenta ou fase de propagação da chama e pós queima ou fase de conclusão da combustão (Ferrari, 2000) (Ganesan, 1994). A Figura 3.15 ilustra essas fases.

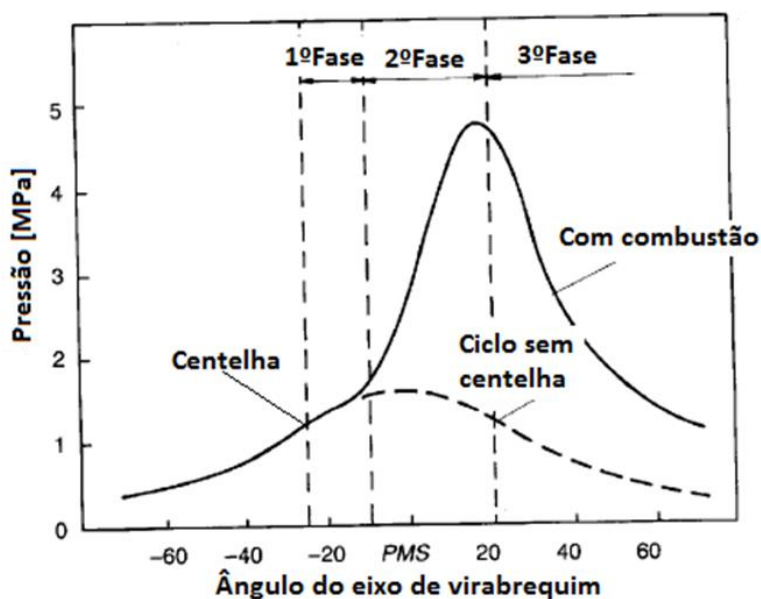


Figura 3.15 – Fases da combustão. Fonte: adaptado de (Ferrari, 2000)

A primeira fase, incubação ou fase de desenvolvimento da chama, começa com a centelha elétrica produzida pela vela de ignição, normalmente entre 10° e 30° antes do PMS. A liberação de calor de forma intensa e concentrada nessa região provoca o aumento da temperatura, vaporização do combustível e a ignição do mesmo, dando início assim ao processo de combustão. O atraso de ignição é devido ao tempo necessário para que as reações de oxidação do combustível comecem quando ele está submetido a altas temperaturas (Ganesan, 1994). Após um tempo, a velocidade das reações de oxidação aumenta, identificada pelo leve aumento da pressão, formando o núcleo (do inglês *Kernel*) que é o início da frente de chama, formado entre os eletrodos da vela de ignição.

Esse núcleo esférico se propaga na câmara de combustão. No início, ele não gera energia suficiente para aquecer rapidamente os gases ao redor e, assim, se propaga muito lentamente. Por sua vez, a pressão do cilindro não aumenta muito. O desenvolvimento do núcleo é muito complexo, governado por uma série de fatores, como parâmetros de combustão, composição da mistura, energia da centelha e geometria da vela de ignição. Nesse período, a velocidade de queima aproxima-se da velocidade de queima laminar (Ozdor, et al., 1994). O desenvolvimento do núcleo é geralmente considerado pelo consumo dos primeiros 5% da mistura ar-combustível, algumas fontes usam os primeiros 10%.

Somente depois do consumo de 5-10% da mistura ar-combustível, a segunda fase, combustão turbulenta ou fase de propagação da chama, é iniciada. Caracterizada pela propagação rápida da frente da chama de forma turbulenta e totalmente desenvolvida, através da maior parte da câmara de combustão (Ferrari, 2000), a Figura 3.16 ilustra o início dessa fase. Praticamente todo trabalho útil produzido em um ciclo do motor é o resultado do período de propagação da chama. Nesse período, a maior parte da mistura ar-combustível é queimada (80-90%) (Pulkrabek, 1997).

Essa fase inicia-se com a estabilização da propagação da chama turbulenta e termina quando quase toda a carga do cilindro é consumida. A presença de movimento de carga, tais como *swirl*, *tumble* ou *squish*, distorce a forma da frente de chama, inicialmente esférica, e a espalha ao longo da câmara de combustão. No entanto, quanto maior for a taxa de queima do combustível, menor será a distorção da frente de chama e menor será a distância que o núcleo da chama pode ser deslocado (Ozdor, et al., 1994).

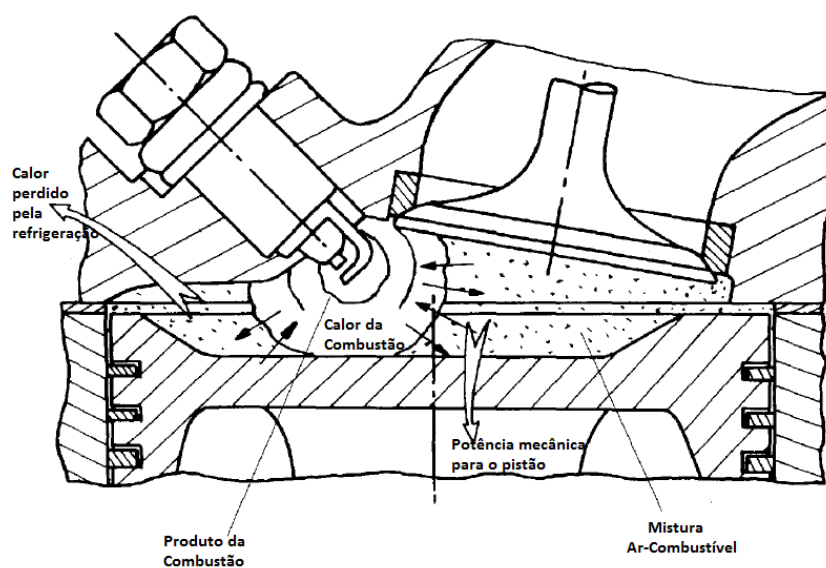


Figura 3.16 - Propagação da frente de chama. Fonte: adaptado de (Ferrari, 2000)

A queima dos 5% finais (algumas fontes usam 10%) da massa ar-combustível é classificada como pós queima ou fase de conclusão da combustão. Durante esse período, a pressão diminui rapidamente, a frente de chama atinge os cantos extremos da câmara de combustão, dissipando o calor pelas paredes e reduzindo a velocidade da chama até a sua extinção.

Assim, uma combustão normal, como descrita acima, é iniciada pela centelha e consome a mistura ar-combustível, transformando-os em produtos de combustão de

modo razoavelmente uniforme. Entretanto, sob algumas condições de operação, o processo de combustão é desviado do seu curso normal, levando a perdas de desempenho e, em alguns casos, possíveis danos mecânicos ao motor (Ganesan, 1994). Esse processo acontece quando a frente de chama é iniciada por outro mecanismo além da centelha elétrica ou quando parte da mistura é consumida em taxas extremamente altas (Baeta, 2006). Sendo esses processos separados em dois tipos: pré-ignição e pós-ignição.

A pré-ignição é caracterizada quando a mistura ar-combustível é inflamada pela sua exposição a pontos de elevada temperatura na câmara de combustão. Ela pode ser dividida em dois tipos, pré-ignição, caso ocorra antes da centelha elétrica, e pós-ignição, caso ela ocorra depois. Normalmente, ela é ocasionada por alguns fatores, tais como elevadas razões volumétricas de compressão, altas velocidades de operação e formação de depósitos na câmara de combustão (Rodrigues Filho, 2014).

Já na pós-ignição, uma frente de chama regular é primeiro iniciada pela ignição da centelha elétrica. Isso aumenta a pressão e a temperatura em toda a câmara de combustão, isto é, esse aumento ocorre também na mistura ar-combustível não queimada. Sob pressão e temperatura aumentadas, pré-reações ocorrem na mistura fresca, que em caso extremo podem levar à autoignição da mistura. Assim, esse processo anormal é caracterizado quando a frente de chama regular não atinge as extremidades da câmara de combustão rapidamente, ocorrendo a autoignição da mistura não queimada antes que a frente de chama chegue nessa região. Dessa forma, a mistura nessas áreas novas queima abruptamente, gerando ondas de pressão que refletem contra a combustão das paredes da câmara (Merker, et al., 2009).

Levando então ao processo de detonação, popularmente chamado de “batida de pino”, que se refere à interação de duas ou mais frentes de chama que se colidem. Essa colisão causa uma liberação rápida de energia na forma de uma onda de choque supersônica (Rodrigues Filho, 2014). A presença da detonação pode ser observada pelas oscilações criadas na curva de pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do motor, como mostra a Figura 3.17.

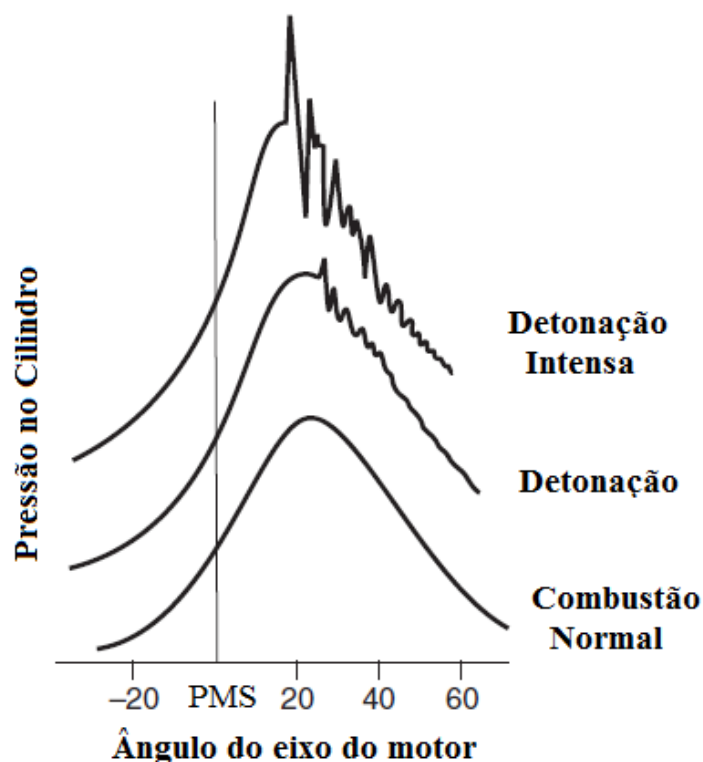


Figura 3.17 – Curvas de pressão no cilindro com e sem detonação. Fonte: adaptado de (Ferguson, et al., 2016)

3.4.2 MODELAGEM DA COMBUSTÃO

Em um sentido amplo, pode-se entender a combustão como um conjunto de reações de caráter exotérmico que se manifestam de maneira rápida, podendo ou não ocorrer o aparecimento das radiações visíveis (Cancino, 2004). O conhecimento da composição dos gases e principalmente os produtos da combustão, bem como sua adequação às legislações ambientais, desempenham um papel cada vez maior no estudo e desenvolvimento de motores de combustão interna. As emissões de poluentes provenientes de motores derivam de fenômenos encontrados durante a combustão e processos de expansão dos gases. Existem duas abordagens na literatura para o cálculo da composição dos gases e predição das emissões: o equilíbrio químico e a cinética química (Way, 1976).

No equilíbrio químico, as concentrações ou pressões parciais dos reagentes e produtos encontram-se em um estado estacionário. Esta abordagem acaba prevendo de forma qualitativa a formação e emissão de poluentes, assumindo sempre que os gases terão tempo suficiente para alcançar o equilíbrio no motor. Os códigos computacionais

que calculam o equilíbrio químico requerem uma análise combinada da primeira e segunda leis da termodinâmica.

A cinética química baseia-se na velocidade em que as reações ocorrem e nos fatores que as influenciam. Com isso, ela leva em consideração as taxas de consumo e/ou produção de cada espécie na previsão de poluentes e emissões, considerando a influência do tempo que cada processo químico requer de acordo com a condição submetida. Permitindo, assim, uma compreensão da natureza das reações químicas, das ligações que se formam ou são quebradas, da energia envolvida e da sua estabilidade (Cancino, 2004).

Comparando as duas abordagens qualitativamente, quando se analisa a composição dos gases de exaustão, principalmente em relação ao óxido de nitrogênio (NO) e monóxido de carbono (CO), eles apresentam uma concentração mais elevada do que as previstas no equilíbrio químico. A explicação dessa discrepância reside no comportamento de não-equilíbrio dos gases poluentes durante a fase de expansão. Aparentemente, durante o processo de combustão, o NO e o CO são rapidamente formados e alcançam níveis perto dos estimados no equilíbrio químico à temperatura de combustão. Porém, à medida que o processo de expansão prossegue, a temperatura dos produtos de combustão diminui, e mantendo a abordagem do equilíbrio químico, esses gases NO e CO deveriam se decompor. Aparentemente, as reações que o NO e CO se decompõem são mais lentas que os eventos do ciclo do motor, não havendo tempo significativo para a sua decomposição completa. A taxa de decomposição dessas reações diminui rapidamente à temperatura da exaustão e, por isso, as concentrações de NO e do CO são consideradas como "congeladas" ou fixadas na concentração relativa ao pico da temperatura da combustão (Spadaccini, et al., 1972).

Esse comportamento de quase-equilíbrio na formação de poluentes em motores de combustão interna, na qual o ciclo de funcionamento do motor não fornece tempo suficiente para atingir o equilíbrio químico completo, torna a cinética química uma alternativa mais precisa para avaliar a formação dos poluentes no processo de combustão.

3.5 MODELOS CINÉTICOS QUÍMICOS

O mecanismo cinético químico é um conjunto de equações algébricas não lineares que descrevem a taxa de transformação de reagentes em produtos. Estas taxas de reação ou transformação são funções fortemente relacionadas de forma não linear com a temperatura, as concentrações de espécies químicas e a pressão. As taxas de reação química, por sua vez, alteram a massa das espécies químicas e a energia sensível da mistura (Pacheco, 2016).

O mecanismo cinético químico é composto pelo conjunto de reações químicas elementares reversíveis envolvendo as espécies químicas produzidas e consumidas no processo de combustão. Visto que as velocidades dessas reações estão fortemente ligadas à temperatura, em complemento à descrição de cada reação, temos em um mecanismo cinético a Equação 3.10 de Arrhenius modificada:

$$k_{fr} = A_f T^n \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (3.10)$$

Na qual, k_{fr} é o coeficiente de velocidade de reação, A_f é o fator pré-exponencial, T é a temperatura, n é o expoente da temperatura, R é a constante universal dos gases e E é a energia de ativação (VI Escola de Combustão, 2017).

O número de espécies e reações elementares envolvidas no mecanismo cinético têm um impacto importante, pois implica na solução de equação da conservação de massa, momentum e energia para cada espécie química, que por sua vez eleva o custo computacional necessário para seu cálculo. Dessa forma, a descrição da cinética química, dependendo do nível de complexidade, pode ser classificada como detalhada, reduzida ou global. Um mecanismo detalhado descreve todas as reações e espécies intermediárias existentes até o final do processo de combustão. Assim, dependendo do tamanho do mecanismo detalhado, da precisão ou resultados requeridos nessa modelagem e o limite computacional disponível, resultam no uso de mecanismos reduzidos ou globais.

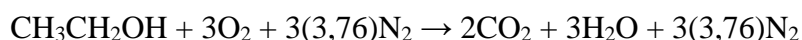
O mecanismo reduzido apresenta um número menor de reações e espécies comparado ao mecanismo detalhado. O processo de redução de um mecanismo envolve a eliminação, tanto de espécies químicas quanto de reações elementares que não são tão

relevantes. O critério para essa eliminação está geralmente correlacionado a uma aplicação específica, sendo a análise de sensibilidade um dos meios para a geração desses mecanismos reduzidos. Assim, por exemplo, um mecanismo pode fornecer resultados precisos para a previsão do atraso de ignição, enquanto outro, apresenta uma previsão acurada para a velocidade de propagação de chama (Turns, 2013).

Os modelos cinéticos globais estão limitados a um pequeno número de reações químicas e espécies. É muito comum encontrar mecanismos globais de um ou duas reações envolvendo três ou quatro espécies químicas para os hidrocarbonetos mais utilizados na indústria (Cancino, 2009). Dessa forma, para a aplicação em motores, geralmente utiliza-se mecanismo cinéticos químicos reduzidos para descrever o processo de combustão.

3.5.1 MECANISMOS CINÉTICOS PARA O ETANOL

A reação global da combustão do etanol pode ser representada por:



Porém esse processo de oxidação ocorre em várias etapas. O início desse processo ocorre pela decomposição direta do etanol nas espécies C_2H_4 , CH_3CHOH , $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ e $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}$, que ocorrem em temperaturas relativamente altas. Em temperaturas intermediárias ou baixas, o etanol reage para formar CH_3CHOH , $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ e $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}$ através de reações de abstração de hidrogênio. O radical $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}$ se decompõe instantaneamente em acetaldeído e radical hidrogênio, como também em formaldeído e metanol (CH_3). As reações de decomposição de $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$, para formar C_2H_4 e OH , e CH_3CHOH , para formar acetaldeído e H , requerem um terceiro corpo. As reações metástases de radicais OH prevalecem sobre as reações correspondentes de H , O , CH_3 e HO_2 e representam mais de 50-70% do consumo total de etanol. Os radicais etanol reagem ainda com oxigênio formando formaldeídos e outras espécies de carbono único (Ra, et al., 2008) (Frassoldati, et al., 2010). A Figura 3.18 mostra os principais caminhos de oxidação do etanol.

Tabela 3.2 – Mecanismos cinéticos químicos para o Etanol

Referência	Espécies	Reações	Parâmetro Avaliado
(Norton, et al., 1992)	32	142	Perfis de concentração de espécies
(Marinov, 1999)	56	351	Velocidade laminar de chama Atraso de Ignição
(Saxena, et al., 2007)	57	288	Atraso de autoignição, Velocidade laminar de chama, Estruturas de difusão de contra fluxo, Chamas pré-misturadas e de difusão
(Li, et al., 2007)	39	238	Velocidade laminar de chama Atraso de Ignição Estruturas de difusão de contra fluxo
(Röhl, et al., 2009)	38	228	Atraso de Ignição Velocidade laminar de chama Temperatura adiabática
(Leplat, et al., 2010)	36	252	Ignição em um tubo de choque, Combustão em chamas pré-misturadas, parcialmente-misturadas e não misturadas
(Cancino, et al., 2010)	136	1349	Atraso de Ignição
(Mittal, et al., 2014)	113	710	Atraso de Ignição
(Maurya, et al., 2016) (Maurya, et al., 2016)	47	272	Atraso de Ignição Modelo zero dimensional para HCCI (ignição por compressão de carga homogênea, do inglês, <i>Homogeneous Charge Compression Ignition</i>)

3.5.2 MECANISMOS CINÉTICOS PARA A GASOLINA

Enquanto os mecanismos químicos para a combustão de etanol estão amplamente validados na literatura, a química detalhada da combustão da gasolina é muito mais complexa. Como explicado anteriormente, a gasolina é uma mistura de centenas de hidrocarbonetos diferentes, e sua composição pode variar dependendo da fonte de petróleo bruto da qual foi extraída, os processos de refino utilizados e os fatores sazonais.

Devido à complexidade da gasolina, para estudar o seu comportamento, utiliza-se um combustível substituto (do inglês, *surrogate fuel*). Um combustível substituto consiste em um pequeno número de componentes que podem ser usados para

representar o combustível real e ainda prever suas características. Essas características desejáveis podem incluir comportamento de ignição, velocidade de queima, viscosidade, vaporização e emissões como monóxido de carbono, hidrocarbonetos, particulados e óxidos de nitrogênio (Metcalf, et al., 2007).

Em complemento ao *surrogate fuel*, no final do século 20, introduziu-se o conceito de combustível de referência primária, PRF (do inglês, *Reference Primary Fuel*), para os mecanismos cinéticos químicos. Sendo o foco inicial da criação desses modelos o entendimento das características de autoignição e da detonação em motores baseadas no *surrogate fuel* (Sarathy, et al., 2018). Assim, o PRF é uma mistura de n-heptano e iso-octano cujo índice de octano é semelhante ao da gasolina típica (Ra, et al., 2008).

Entretanto, a gasolina contém alguns compostos aromáticos, e sua influência deve ser também considerada no mecanismo. Sendo o tolueno o composto aromático mais representativo, ele foi adicionado ao PRF. Essa composição ternária, n-heptano, iso-octano e tolueno recebe uma denominação especial: combustível de referência ternário, TRF (do inglês, *Ternary Reference Fuel*) (Zhen, et al., 2017).

O PRF e TRF são as composições mais típicas para a representação da gasolina. As formulações que apresentam outros componentes, além dos presentes no TRF, são classificadas como multicomponentes, não recebendo um nome específico. Esses multicomponentes tentam representar alguns dos outros compostos de hidrocarbonetos presentes na gasolina, como parafinas, naftenos, olefinas e aromáticos (Sarathy, et al., 2018). Na Tabela 3.3, são mostrados alguns mecanismos cinéticos desenvolvidos para representar a gasolina nos últimos anos.

Tabela 3.3 – Mecanismos cinéticos químicos para a Gasolina

Referência	Espécies	Reações	Composição	Parâmetro Avaliado
(Lawrence Livermore National Laboratory, 2002)	1034	4236	Isoctano, n-heptano	-
(Chaos, et al., 2007)	107	723	Isoctano e n-heptano	Atraso de Ignição pre-misturada Premixed e Velocidade Laminar de chama
(Chaos, et al., 2007)	469	1221	Isoctano, n-heptano e Tolueno	Atraso de Ignição e Velocidade Laminar de chama
(Bounaceur , et al., 2009)	-	5800	Isoctano, n-heptano, hexeno e Tolueno	Atraso de Ignição
(Cancino, et al., 2009)	1053	4277	Isoctano, n-heptano e Tolueno	Atraso de Ignição
(Mehl, et al., 2011)	312	-	Isoctano, n-heptano, Tolueno e 2-Penteno	Atraso de Ignição e Velocidade Laminar de chama
(Andrae, 2013)	137	635	Tolueno, Isoctano e n-heptano	Atraso de Ignição e Velocidade Laminar de chama
(Huang, 2014)	120	677	Isoctano, Tolueno e n-heptano	Atraso de Ignição Velocidade e laminar de chama
(Li, et al., 1016)	1251	5705	Isoctano, n-heptano e Tolueno	Atraso de Ignição

3.5.3 MECANISMOS CINÉTICOS QUÍMICOS PARA A MISTURA DE GASOLINA E ETANOL

A formulação de mecanismos que representem a mistura da Gasolina e Etanol começa pela seleção de um mecanismo detalhado do etanol, um mecanismo detalhado da gasolina, podendo ser um PRF, TRF e algum outro mecanismo, caso se queira adicionar mais algum componente para a gasolina, como por exemplo o penteno e o hexeno. Dessa seleção, pode-se realizar a redução a partir de um mecanismo composto pela junção dos citados acima, como também pela redução inicial da parte representativa da gasolina separada da representante do etanol. A Tabela 3.4 mostra alguns mecanismos desenvolvidos para a mistura de gasolina e etanol.

Tabela 3.4 – Mecanismos cinéticos químicos para misturas de Gasolina e Etanol

Autor	Espécies	Reações	Composição	Parâmetro Avaliado
(Togbé, et al., 2009)	235	1866	Isoctano, Tolueno, 1-Hexeno e Metanol	Velocidade laminar de chama e Atraso de Ignição
(Andrae, 2008)	1083	4639	Isoctano, n-heptano, Tolueno, diisobutileno e Etanol	Atraso de Ignição
(Cancino, et al., 2009)	1042	4390	Isoctano, n-heptano, Tolueno e Etanol	Atraso de Ignição
(Cancino, et al., 2009)	1085	4748	Isoctano, n-heptano e Etanol	Atraso de Ignição
(Cai, et al., 2015)	335	1610	Isoctano, n-heptano, Tolueno e Etanol	Velocidade laminar de chama, Atraso de Ignição, Velocidade de chama adiabática
(Abianeh, et al., 2015)	66	215	Isoctano, n-heptano, Tolueno e Etanol	Curva de destilação, Atraso de Ignição e Velocidade laminar de chama

Como pode ser notado, em todos os mecanismos cinéticos citados na Tabela 3.2, Tabela 3.3 e Tabela 3.4, somente um levou em consideração, entre os parâmetros avaliados para a validação, a sua reprodução na modelagem do motor. Porém, limitou-se a uma análise zero dimensional. Alguns desses mecanismos são extremamente extensos, como o de Hua *et al*, para representar a gasolina, o que o torna impossível para essa aplicação. Essa relação entre número de espécies e reações mínimas que representam a oxidação de um combustível ainda persiste como uma área de grande espaço para estudo. Principalmente na redução de mecanismos cinéticos químicos para uma aplicação em modelagem numérica tridimensional por dinâmica dos fluidos computacional.

3.6 SOLUÇÃO NUMÉRICA

A dinâmica dos fluidos computacional, CFD (do inglês, *Computational fluid dynamics*), vem desempenhando cada vez mais um papel de destaque na indústria, em especial na simulação dos processos físicos e químicos dos motores, possibilitando sua descrição detalhada; sendo ela muito explorada na fase conceitual, pois a construção e experimentação de protótipos é uma etapa cara e muitas vezes lenta, podendo algumas dessas etapas serem substituídas por simulações CFD. Em complemento, cabe também destacar o seu uso na investigação e diagnóstico de problemas onde não houve a possibilidade de diagnóstico por meio de ensaios experimentais.

Dessa maneira, o presente trabalho utiliza dois programas comerciais na modelagem computacional de um motor de ignição por centelha. O primeiro foi GT-ISE da empresa Gama Technologies, que possui um ambiente específico para a modelagem de motores de combustão interna denominado GT-Power. Nele, todo o sistema é modelado unidimensionalmente pelo método dos volumes finitos. Ele resolve as equações da conservação da massa, conservação da quantidade de movimento, conservação da energia; calculando também as transferências de calor, as perdas por atrito e a combustão.

O segundo programa utilizado é o Converge CFD, que também modela pelo método dos volumes finitos, porém em uma abordagem tridimensional. Esse programa também resolve as equações de transporte e conservação, além dos fenômenos de turbulência. Devido à extensão desse assunto, nos próximos tópicos, 3.7 e 3.8, serão descritos alguns modelos específicos da abordagem unidimensional e tridimensional, respectivamente, utilizados neste trabalho. Para uma revisão geral e/ou detalhamento mais aprofundado do assunto, recomenda-se a leitura dos manuais de cada programa (Gama Technologies, 2016), (Gama Technologies, 2016), (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017), além dos livros referenciados pelos números: (Versteeg, et al., 2007) (Baumgarten, 2006) .

3.7 MODELAGEM UNIDIMENSIONAL DE MOTORES

Todo o sistema é discretizado em volumes menores, onde cada divisão do fluxo é representada por um único volume de duas dimensões, e cada tubo é dividido em um ou mais volumes. Esses volumes estão conectados nos seus limites. As variáveis escalares (pressão, temperatura, densidade, energia interna, entalpia, concentrações de espécies, etc.) são assumidas como uniformes em cada volume. As variáveis vetoriais (escoamento de massa, velocidade, escoamento de frações de massa etc.) são calculadas no limite de cada volume. Esse tipo de discretização é chamado de "grade escalonada" (do inglês, *staggered grid*), ilustrada pela Figura 3.19.

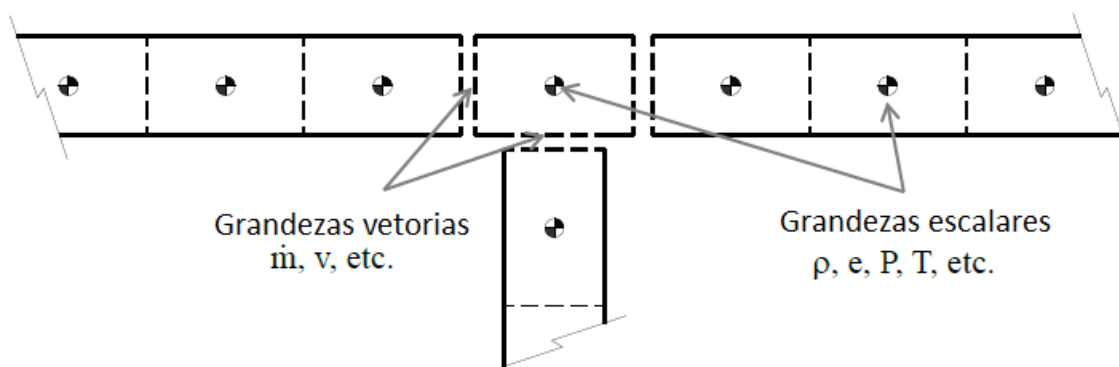


Figura 3.19 - Esquema da abordagem de grade escalonada: grandezas escalares calculadas em centroide, grandezas vetores nos limites. Fonte: adaptado de (Gama Technologies, 2016).

Existem duas opções de métodos de integração de tempo, que afetam as variáveis da solução e os limites nas etapas de tempo. Os métodos de integração de tempo incluem um integrador explícito e um implícito. As principais variáveis da solução no método explícito são o escoamento de massa, a densidade e a energia interna. As variáveis principais da solução no método implícito são o escoamento de massa, a pressão e a entalpia total.

No método explícito, o valor de pressão, a temperatura, por exemplo, é baseado nos valores apenas do subvolume em questão e seus vizinhos. O cálculo é direto e não requer iteração. Para garantir a estabilidade numérica, o intervalo de tempo e o comprimento de discretização estão relacionados e devem satisfazer o número de

Courant. Podendo essa relação ser descrita pela Equação 3.11 (Gama Technologies, 2016).

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} (|u| + c) \leq 0,8 m_{rs} \quad (3.11)$$

Sendo Δx o comprimento mínimo do elemento discretizado, u a velocidade do fluido, c a velocidade do som, m_{rs} o multiplicador de passo de tempo especificado pelo usuário no *RunSetup* (que deve ser menor ou igual a 1,0) e Δt o passo de tempo, dado pela Equação 3.12.

$$\Delta t \propto \frac{\rho V}{\rho A_{eff} c} \quad (3.12)$$

Na qual V é o volume, ρ a densidade do fluido, A_{eff} a área para fluxo e c a velocidade do som.

3.7.1 EQUAÇÕES GOVERNANTES

No GT-Power, o modelamento do escoamento de fluido envolve a solução das equações de Navier-Stokes, da continuidade e energia. Essas equações são resolvidas em uma dimensão, o que significa que todas as quantidades são médias ao longo da direção do escoamento. Além dos recursos de escoamento de fluido e transferência de calor, o código contém muitos outros modelos especializados necessários para a análise dos processos existentes no motor (Gama Technologies, 2016) (Gama Technologies, 2016).

A Equação 3.13 da continuidade ou conservação da massa é abordada em uma dimensão pela variação da massa dentro do volume de controle igual ao somatório das massas que entram e saem da fronteira (Gama Technologies, 2016).

$$\frac{dm}{dt} = \sum_{fronteira} \dot{m} \quad (3.13)$$

Sendo m a massa do volume e \dot{m} o escoamento de massa na fronteira do volume. A conservação da energia podendo ser definida pela taxa de variação da energia igual ao somatório das quantidades de energia através da fronteira, sendo eles o trabalho e o calor, como descrito na Equação 3.14.

$$\frac{d(me)}{dt} = -p \frac{dV}{dt} + \sum_{fronteira} (\dot{m}H) - hA_S(T_{fluido} - T_{parede}) \quad (3.14)$$

Na qual e é energia interna total, p é a pressão, V é o volume, H é a entalpia específica total, h é o coeficiente de transferência de calor, A_S é o calor transferido pela área superficial, T_{fluido} é a temperatura do fluido e T_{parede} é a temperatura da parede. A equação da conservação do *momentum* que relaciona as pressões líquidas e as forças de cisalhamento na superfície da fronteira e a quantidade de movimento, sendo dada pela Equação 3.15.

$$\frac{d\dot{m}}{dt} = \frac{dpA + \sum_{fronteira}(\dot{m}u) - 4C_f \frac{\rho u |u|}{2} \frac{dxA}{D} - K_p \left(\frac{1}{2} \rho u |u|\right) A}{dx} \quad (3.15)$$

Onde A é a área do fluxo transversal, u é a velocidade, C_f é o fator de fricção de Fanning, ρ é a densidade, D é o diâmetro equivalente e K_p é o coeficiente de perda por pressão.

3.7.2 CORRELAÇÃO DE WOSCHNI

O modelo de transferência de calor em cilindro em programas unidimensionais foi desenvolvido por Woschni em 1967. Sendo um dos modelos presentes, o WoschniGT. Ele é baseado na correlação Woschni clássica sem *swirl*. A diferença mais importante reside no tratamento dos coeficientes de transferência de calor durante o período em que as válvulas estão abertas, onde a transferência de calor é aumentada pelas velocidades do escoamento através das válvulas de admissão e também pelo escoamento reverso através das válvulas de exaustão. O expoente de temperatura também foi alterado, recebendo o valor de -0.5 para uma eficiência computacional. O

coeficiente de transferência de calor por convecção seguindo o modelo WoschniGT pode ser definido pela Equação 3.16 (Gama Technologies, 2016):

$$h_c = \frac{K_1 p^{0,8} w^{0,8}}{B^{0,2} T^{K_2}} \quad (3.16)$$

Onde h_c é o coeficiente de transferência de calor convectivo, B é o diâmetro do cilindro, K_1 e K_2 são constantes do modelo WoschniGT, sendo seus valores respectivamente 3,01426 e 0,50, p é a pressão no cilindro, T é a temperatura no cilindro e w é a velocidade média do gás do cilindro, sendo ela dada pela Equação 3.17.

$$w = C_1 \bar{S}_p + C_2 \frac{V_d T_r}{P_r V_r} (p_i - p_m) \quad (3.17)$$

Na qual \bar{S}_p é a velocidade média do pistão, T_r é temperatura do fluido de trabalho antes da combustão, p_i é a pressão instantânea do fluido, p_m é a pressão do fluido em *motoring* no mesmo ângulo que p , P_r é a pressão do fluido de trabalho antes da combustão, V_d é o volume deslocado, V_r é o volume do fluido de trabalho antes da combustão e C_1 e C_2 são constantes do modelo WoschniGT que podem ser definidas respectivamente na Equação 3.18 e Tabela 3.5.

$$C_1 = 2,28$$

$$+3,9 \text{ MIN} \left(\frac{\text{Massa no cilindro que passou pelas válvulas}}{\text{Massa aprisionada} * \text{Frequência do Motor}}, 1 \right) \quad (3.18)$$

Tabela 3.5 - Constante C_2 para Woschni GT-Power. Fonte: retirado de (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017)

Momento	C_2
Durante as trocas de gases e período de compressão	0,00
Durante o período de combustão e expansão	3,24 E-3

3.7.3 COMBUSTÃO EM DUAS ZONAS

A combustão refere-se à transferência de uma quantidade definida de massa de combustível não queimada e ar juntamente com a entalpia associada de uma zona não queimada para uma zona queimada no cilindro. Sendo resultado da liberação da energia química da mistura ar-combustível, do cálculo das espécies químicas e as suas concentrações.

Dessa maneira, o processo de combustão se inicia pela liberação de calor da centelha e o cilindro é dividido em duas zonas: uma zona não queimada e uma zona queimada. Todo o conteúdo do cilindro nesse momento começa na zona não queimada, incluindo gases residuais do ciclo anterior. A cada passo de tempo, uma parte da mistura de ar-combustível é transferida da zona não queimada para a zona queimada. Na qual a quantidade de mistura ar-combustível transferida para a zona queimada é definida pela taxa de queima. Esta taxa de queima é prescrita (ou calculada pelo) modelo de combustão.

Uma vez que a mistura ar-combustível tenha sido transferida da zona não queimada para a zona queimada em um determinado intervalo de tempo, um cálculo de equilíbrio químico é realizado para toda a zona queimada. Este cálculo leva em conta todos os átomos de cada espécie (C, H, O, N, S, Ar) presentes na zona queimada naquele tempo e obtém destes uma concentração de equilíbrio dos 13 produtos de espécies de combustão (N₂, O₂, H₂O, CO₂, CO, H₂, N, O, H, NO, OH, SO₂, Ar). As concentrações de equilíbrio das espécies dependem da temperatura atual da zona queimada e, em menor grau, da pressão no cilindro. Em seguida, a energia interna de cada espécie é calculada. Então, a energia de toda a zona queimada é obtida pelo somatório de todas as espécies químicas. Aplicando o princípio da conservação da energia, as novas temperaturas da zona não queimada e queimada podem ser obtidas (Gama Technologies, 2016). A Equação 3.19e a Equação 3.20 descrevem a conservação da energia em cada intervalo de tempo calculado.

Zona não queimada:

$$\frac{d(m_u e_u)}{dt} = -p \frac{dV_u}{dt} - Q_u + \left(\frac{dm_f}{dt} h_f + \frac{dm_a}{dt} h_a \right) + \frac{d_{m_{uf,i}}}{dt} h_{f,i} \quad (3.19)$$

Zona queimada:

$$\frac{d(m_b e_b)}{dt} = -p \frac{dV_b}{dt} - Q_b + \left(\frac{dm_f}{dt} h_f + \frac{dm_a}{dt} h_a \right) \quad (3.20)$$

Onde m_u é a massa da zona não queimada (do inglês, *unburned*), e_u é a energia da zona não queimada, V_u é o volume da zona não queimada, Q_u é a taxa de transferência de calor da zona não queimada. Essas mesmas variáveis indentificadas com o índice b refere-se à zona queimada (do inglês *burned*). p é a pressão no cilindro, m_f é a massa de combustível, m_a é a massa de ar, $m_{u,f,i}$ é a massa de combustível injetado, $h_{f,i}$ é a entalpia da massa de combustível injetado, h_f é a entalpia da massa de combustível e h_a é a entalpia da massa de ar.

3.7.4 MODELO PRESCRITIVO - COMBUSTÃO POR WIEBE

Um modelo de combustão prescritivo simplesmente impõe a taxa de queima em função do ângulo de virabrequim. Essa taxa de queima prescrita será seguida independentemente das condições no cilindro, assumindo que há combustível suficiente disponível no cilindro para suportar a taxa de queima. Portanto, a taxa de queima não será afetada por fatores como fração residual ou tempo de injeção. Um dos modelos prescritivos disponíveis no GT-Power é a combustão por Wiebe.

A função Wiebe impõe a taxa de queima para motores de ignição por centelha, se aproximando da forma "típica" de uma taxa de queima. Esse modelo fornece um meio conveniente de implementar uma taxa de queima razoável se a pressão do cilindro medida não estiver disponível. Dessa forma, o usuário deve fornecer os seguintes dados de entrada (Gama Technologies, 2016):

AA = Ângulo de Ancoragem

D = Duração da combustão

E = Expoente de Wiebe

CE = Fração de Combustível Queimado

BE = Porcentagem de combustível queimado no Ângulo de Ancoragem (sendo 50% o padrão)

BS = Porcentagem de combustível queimado no início da combustão (sendo 10% o padrão)

BE = Porcentagem de combustível queimado no fim da combustão (sendo 90% o padrão)

Sendo as equações do modelo de Wiebe dadas a seguir. A Equação 3.21 representa a constante de 50% de queima; a Equação 3.22, a Constante início de queima; a Equação 3.23, a Constante final de queima; a Equação 3.24, a constante de Wiebe; a Equação 3.25, o início da combustão e a Equação 3.26, a taxa de queima (Gama Technologies, 2016):

$$BMC = -\ln(1 - BM) \quad (3.21)$$

$$BSC = \ln(1 - BS) \quad (3.22)$$

$$BEC = \ln(1 - BE) \quad (3.23)$$

$$WC = \left[\frac{D}{BEC^{1/(E+1)} - BSC^{1/(E+1)}} \right]^{-(E+1)} \quad (3.24)$$

$$SOC = AA - \frac{(D)(BMC)^{1/(E+1)}}{BEC^{1/(E+1)} - BSC^{1/(E+1)}} \quad (3.25)$$

$$Combustion(\theta) = (CE) \left[1 - e^{-(WC)(\theta - SOC)^{(E+1)}} \right] \quad (3.26)$$

Onde θ é o ângulo de virabrequim instantâneo. Cabe ressaltar que a taxa de queima acumulada é calculada e normalizada para 1,0. A combustão começa em 0,0 (0% queimado) e progride para o valor especificado pela "fração de combustível queimado atributo", que normalmente é de 1,0 ou 100%.

3.7.5 MODELO PRESCRITIVO - TAXA DE QUEIMA PELO TPA

O cálculo de uma taxa de queima a partir da pressão do cilindro medida é algumas vezes chamado de "operação ou cálculo reverso", porque as entradas e saídas do cálculo são invertidas a partir dos cálculos típicos de combustão na simulação do motor. Em uma operação direta, a taxa de queima é o dado de entrada e a pressão do cilindro é o resultado de saída, como na combustão por Wiebe. Em uma análise reversa, a pressão do cilindro é o dado de entrada e a taxa de queima é o resultado saída. Tanto a operação direta como a reversa utilizam as mesmas equações. Não há hipóteses simplificadoras que são aplicadas apenas na operação reversa. Assim, na análise em operação reversa, a quantidade de combustível transferida da zona não queimada para a zona queimada é iterada dentro de cada intervalo de tempo até que a pressão do cilindro calculada corresponda à pressão no cilindro medida (Gama Technologies, 2016).

O método de cálculo taxa de queima a partir da pressão do cilindro utilizado foi o TPA (do inglês *Three Pressure Analysis*). Como o nome já explica, nesse método de cálculo são necessárias três pressões instantâneas como dado de entrada: a pressão na admissão, a pressão no cilindro e a pressão na exaustão. A simulação é executada por vários ciclos até que o modelo tenha convergido. A metodologia de simulação pode ser sintetizada nas seguintes etapas (Gama Technologies, 2016):

- Para o primeiro ciclo, é utilizada uma taxa de queima fictícia e não é realizada nenhuma análise de pressão.
- Para o segundo ciclo e os posteriores, a simulação pausa no início de cada ciclo e calcula a taxa de queima aparente usando as condições aprisionadas no cilindro naquele ponto juntamente com o perfil de pressão medido. O perfil de injeção (se houver um injetor) e a taxa de transferência de calor são retirados dos resultados do ciclo anterior.
- A simulação continua e a taxa de queima aparente calculada na etapa anterior é imposta durante o ciclo.
- Os ciclos se repetem até que a convergência do estado estacionário seja atingida.

O principal benefício dessa abordagem é que todas as grandezas no interior do cilindro são previstas pela simulação, incluindo a taxa de queima e a fração de gases residuais. No entanto, para que esses valores sejam precisos, as características do escoamento e os dados de entrada do modelo devem ser corretos.

3.8 MODELAGEM TRIDIMENSIONAL DE MOTORES

No modelo tridimensional, todo o domínio é subdividido em volumes, como mostra a representação na Figura 3.20. No Converge CFD, todos os valores de transporte são colocados no centro da célula. Esse procedimento pode resultar em um desacoplamento da pressão e da velocidade, podendo produzir flutuações de pressão em células adjacentes em um padrão quadriculado. Para prevenir essas flutuações durante a interpolação, eliminando esse efeito de ‘tabuleiro de xadrez’ indesejável, é usado o algoritmo de Rhie-Chow (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017).

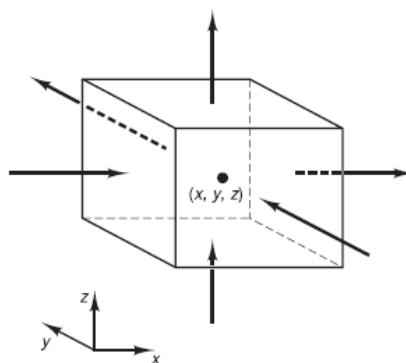


Figura 3.20 – Representação do volume finito. Fonte: retirado de (Versteeg, et al., 2007)

Para o desacoplamento de pressão e velocidade citado acima, o Converge CFD usa o algoritmo PISO (do inglês, *Pressure Implicit with Splitting of Operators*) que parte de um valor estimado, onde inicialmente a equação do *momentum* é resolvida. Em seguida, a equação da pressão é derivada e resolvida, o que resulta em uma correção, sendo ela aplicada à equação de *momentum*. Este processo de correção é repetido até

que a precisão desejada seja alcançada. Só assim as outras equações de transporte são resolvidas.

Em complemento, a simulação tridimensional possui uma complexidade mais elevada comparada com a simulação unidimensional. Sendo então necessários modelos específicos para a reprodução de todos subprocessos ou fenômenos existentes. Para a injeção de combustível e modelagem do *spray*, por exemplo, temos modelos para a reprodução da quebra primária das gotas, da quebra secundária, dos fenômenos de arrasto, de colisão, de coalescência dessas gotas formadas. A Figura 3.21 ressalta alguns desses fenômenos, como a injeção de combustível, formação de mistura, combustão no qual alguns fundamentos teóricos foram explicados ao longo dessa revisão, juntamente com os respectivos parâmetros ou pontos importantes a serem modelados para a sua reprodução.

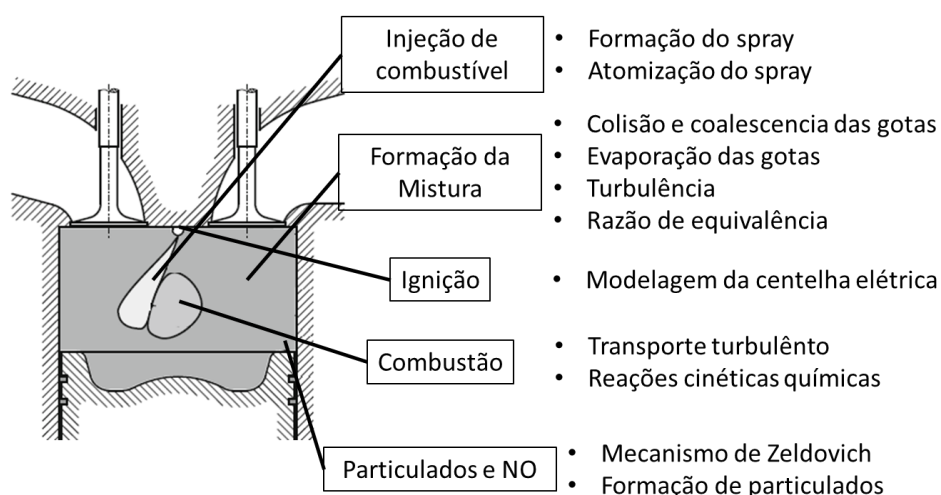


Figura 3.21 - Subprocessos para a modelagem tridimensional de motores de ignição por centelha. Fonte: Autor

3.8.1 EQUAÇÕES GOVERNANTES EM ESCOAMENTO DE FLUIDOS

O fluido será considerado como um *continuum*, sendo seu comportamento descrito em termos de suas propriedades macroscópicas, como velocidade, pressão, densidade e temperatura e seus derivados de espaço e tempo. Uma abordagem Euleriana, onde as propriedades relevantes do escoamento são calculadas em função da posição.

A equação de conservação da massa ou também conhecida como equação da continuidade pode ser descrita de uma forma compacta pela Equação 3.27(3.27) (Versteeg, et al., 2007):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (3.27)$$

Na qual ρ é a densidade, t é o tempo, x_i é a direção i e u_i é a velocidade na direção i . Já a conservação do *momentum* é obtida pela segunda lei de Newton, na qual a taxa de mudança de *momentum* de uma partícula fluida é igual à soma das forças na partícula, podendo ser descrita na Equação 3.28 (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017).

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + S_i \quad (3.28)$$

Sendo P a pressão, S_i é o termo fonte e σ_{ij} é o tensor de tensões viscosas. As tensões viscosas são proporcionais às taxas de deformação (fluido newtoniano), podendo ser definidas como na Equação 3.29, onde μ é a viscosidade dinâmica, que relaciona as deformações lineares, μ' é a viscosidade de dilatação, que relaciona as deformações volumétricas, e δ_{ij} é a função delta de Kronecker.

$$\sigma_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left(\mu' - \frac{2}{3} \mu_t \right) \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (3.29)$$

Caso tenha uma abordagem da turbulência, pelo uso de algum modelo, a viscosidade dinâmica, μ , é substituída pela viscosidade turbulenta, μ_t , dada pela Equação 3.30.

$$\mu_t = \mu + C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.30)$$

Onde C_μ é a constante do modelo de turbulência, k a energia cinética turbulenta e ε a dissipação da energia cinética turbulenta. A Equação 3.31 representa a conservação da energia na qual a taxa de mudança de energia de uma partícula de fluido

é igual à taxa de adição de calor para a partícula de fluido mais a taxa de trabalho feito na partícula (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017).

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j e)}{\partial x_j} \\ = -P \frac{\partial(u_j)}{\partial x_j} + \sigma_{ij} \frac{\partial(u_i)}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K_t \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_t \sum_m h_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + S \end{aligned} \quad (3.31)$$

Sendo e a energia interna específica, K_t a condutividade turbulenta, T a temperatura, D_t o coeficiente de difusão turbulenta de massa, h_m a entalpia da espécie m , Y_m a fração mássica da espécie m e S o termo fonte de energia. O transporte das espécies químicas pode ser descrito pela Equação 3.32.

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \frac{\partial \rho_m u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_t \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + S_m \quad (3.32)$$

Onde D_t é o coeficiente de difusão mássica, S_m é o termo fonte e ρ_m é a densidade de cada espécie m dada pela Equação 3.33.

$$\rho_m = Y_m \rho \quad (3.33)$$

3.8.2 MODELOS DE TURBULÊNCIA

Dois regimes de escoamento podem ocorrer para descrever um fluido que se move. O primeiro, denominado escoamento laminar, é caracterizado pelo movimento em camadas infinitesimais que se movem em trajetórias bem definidas. O segundo, denominado escoamento turbulento, o movimento do fluido é irregular e as velocidades são variáveis no tempo, como ilustra a Figura 3.22. A turbulência ocorre quando as forças viscosas no fluido não são capazes de conterem flutuações aleatórias no movimento e tornando o escoamento caótico. E ela aumenta significativamente a taxa de mistura de *momentum*, energia e espécie.

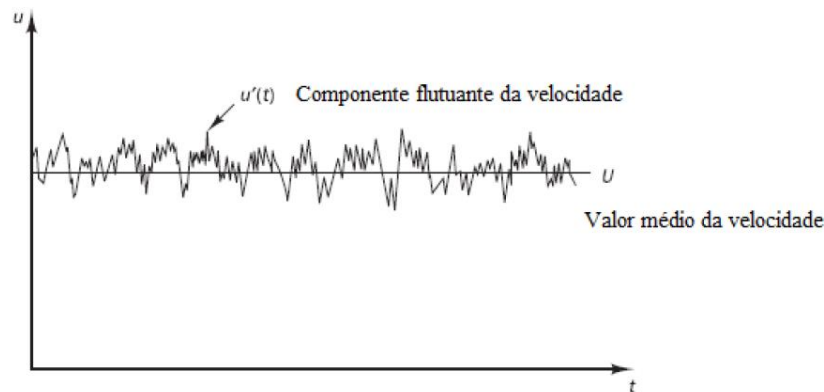


Figura 3.22 – Valor médio e componente flutuante da velocidade em um escoamento turbulento. Fonte: adaptado de (Versteeg, et al., 2007)

Existem alguns métodos para o cálculo da turbulência: o DNS, o LES e o RANS. De uma maneira simplista, esses métodos ou modelos se diferenciam entre a proporção calculada diretamente e a proporção modelada para o tratamento de um mesmo problema de escoamento. A Figura 3.23 mostra uma comparação qualitativa entre essas proporções.

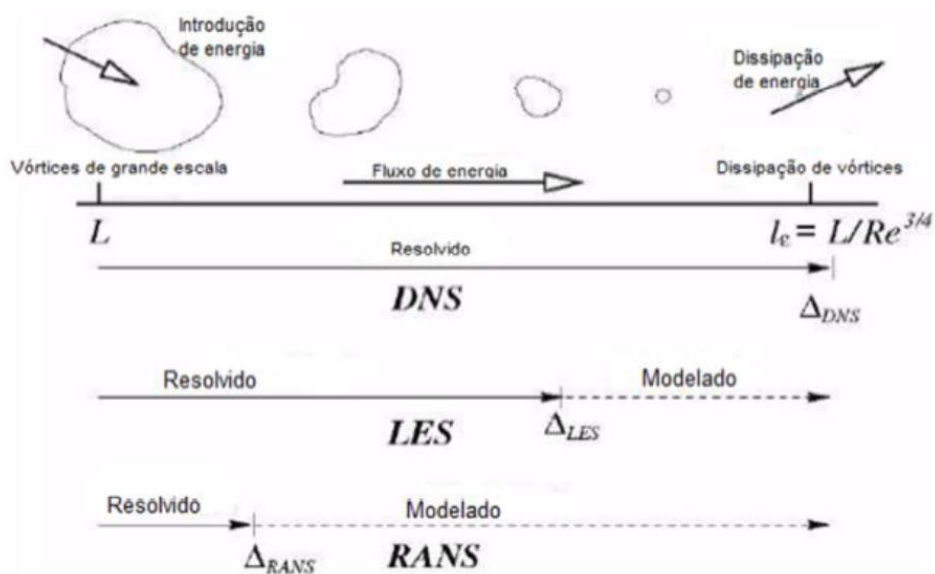


Figura 3.23 – Comparação da proporção modelada e calculada entre o DNS, LES e RANS. Fonte: adaptado de (Sodja, 2007)

O método DNS (do inglês, *Direct Numerical Simulation*) não utiliza uma modelagem para a resolução de um escoamento, resolvendo o escoamento médio e

todas as flutuações presentes, em grandes e pequenas escalas de comprimento. Esses cálculos são altamente caros em termos de recursos de computação, então o método não é usado para cálculos de aplicação industrial. O LES (do inglês, *Large Eddy Simulation*) é uma forma intermediária no modelamento da turbulência, que calcula o comportamento apenas dos grandes vórtices. O método utiliza um filtro computacional no espaço, que permite o cálculo dos grandes vórtices de maneira direta, mas não dos menores vórtices nas escalas de dissipação, que são incluídos pelo modelo de sub-grid. Ela demanda grandes recursos computacionais em termos de armazenamento e cálculo, sendo uma técnica que está começando a resolver problemas com geometrias complexas (Versteeg, et al., 2007).

O método RANS (do inglês, *Reynolds Averaged Navier-Stokes*) baseia-se na média de Reynolds das Equações de Navier-Stokes. É feito um tratamento estatístico para modelar o escoamento tanto no espaço quanto no tempo, o que gera termos extras nas equações, dificultando o tratamento matemático. O problema passa a ter mais incógnitas do que equações para o resolver. Para tal, novas equações são geradas para modelar os efeitos da turbulência, sua classificação depende do número de equações de transporte adicionais ao modelo. Ele demanda um custo computacional modesto, e por isso tem sido a base de cálculo de problemas de engenharia nas últimas décadas.

Nos modelos RANS, as propriedades são separadas em seus valores médios (\bar{u}_i) e em flutuações (u'_i) na forma da Equação 3.34.

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (3.34)$$

Baseados na hipótese de Boussinesq (1877), temos que as tensões de Reynolds são proporcionais às taxas médias de deformação, como descrito na Equação 3.35.

$$\tau_{ij} = -\bar{\rho} \widetilde{u'_i u'_j} = 2\mu_t S_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \right) \quad (3.35)$$

No qual a energia cinética turbulenta é definida como a metade do tensor de tensões (Equação (3.36) e do tensor da taxa de deformação média δ_{ij} descrita pela Equação 3.37.

$$k = \frac{1}{2} \widetilde{u'_i u'_j} \quad (3.36)$$

$$\delta_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.37)$$

Dentre os modelos de duas equações adicionais da família RANS, os modelos de turbulência RNG k- ϵ foram utilizados neste trabalho para a modelagem tridimensional. Sendo criado por Yakhot *et al*, em 1992, esse modelo representa os efeitos da turbulência de pequena escala por meio de uma função nas equações de Navier-Stokes. O RNG k- ϵ , então, remove sistematicamente as pequenas escalas de movimento das equações governantes, expressando seus efeitos em termos de grandes escalas e modificando a viscosidade (Versteeg, et al., 2007).

Uma das equações de transporte adicionais para o cálculo da viscosidade turbulenta, μ_t (Equação 3.38) é a energia cinética turbulenta, k :

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i k)}{\partial x_i} = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\mu}{Pr_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} - \rho \epsilon + \frac{C_s}{1,5} S_s \quad (3.38)$$

Onde 1,5 é um fator empírico da constante, S_s é o termo fonte que representa as interações com a fase discreta, C_s e Pr_k são constantes do modelo. A segunda equação é a dissipação da energia cinética turbulenta, ϵ , dada pela Equação 3.39:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i \epsilon)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Pr_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) + C_{\epsilon 3} \rho \epsilon \frac{\partial (u_i)}{\partial x_i} \\ &+ \left(C_{\epsilon 1} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \tau_{ij} - C_{\epsilon 2} \rho \epsilon + C_s S_s \right) \frac{\epsilon}{k} + S - \rho R \end{aligned} \quad (3.39)$$

Na qual, S é o termo fonte fornecido pelo usuário, Pr_ϵ , $C_{\epsilon 1}$, $C_{\epsilon 2}$, $C_{\epsilon 3}$ são constantes do modelo, R e η são calculadas respectivamente pelas Equação 3.40 e Equação 3.41:

$$R = \frac{C_\mu \eta^3 (1 - \eta/\eta_0) \varepsilon^2}{(1 + \beta \eta^3) k} \quad (3.40)$$

$$\eta = \frac{k}{\varepsilon} |S_{ij}| = \frac{k}{\varepsilon} \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (3.41)$$

O R e η também são constantes do modelo, sendo que as constantes utilizadas do RNG pelo Converge CFD estão sintetizadas pela Tabela 3.6.

Tabela 3.6 – Valores das constantes do modelo RNG k- ε no Converge CFD. Fonte: retirado de (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017)

C_μ	$1/Pr_k$	$1/Pr_\varepsilon$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$	η_0	β	C_s	C_{ps}
0,0845	1,39	1,39	1,42	1,68	-1,0	4,38	0,012	0,0	0,03

3.8.3 INJEÇÃO DE COMBUSTÍVEL

A injeção de combustível em alta velocidade pelo orifícios do injetor resulta na formação do *spray* de combustível, aumento da velocidade do ar circundante, aumento da turbulência no *spray* e sua desintegração em pequenas gotas. Com a penetração na câmara de combustão, essas gotas são atomizadas. Dessa forma, o modelamento do *spray* é descrito por uma abordagem Lagrangeana, onde a propriedade de cada gota é descrita individualmente. O termo *spray* não será traduzido do inglês, visto que essa palavra nessa área de estudos não é usualmente traduzida para o português.

A Figura 3.24 sumariza os fenômenos existentes no processo de atomização do combustível. Quando o *spray* líquido sai pelos orifícios do injetor, ele sofre a ação da cavitação e turbulência, quebrando assim em gotas, caracterizando a quebra primária do *spray*. Essas gotas iniciais estão sujeitas à ação de forças aerodinâmicas (pressão e arrasto) induzidas pela velocidade relativa entre gotas e gás circundante, o que leva a um aumento de instabilidade na superfície ou da gota inteira. Ao mesmo tempo, a força de tensão superficial tenta manter a gota esférica e neutralizar a deformação. Dessa instabilidade, ocorre a quebra secundária das gotas, ou seja, a desintegração das gotas existentes em outras ainda menores (Baumgarten, 2006).

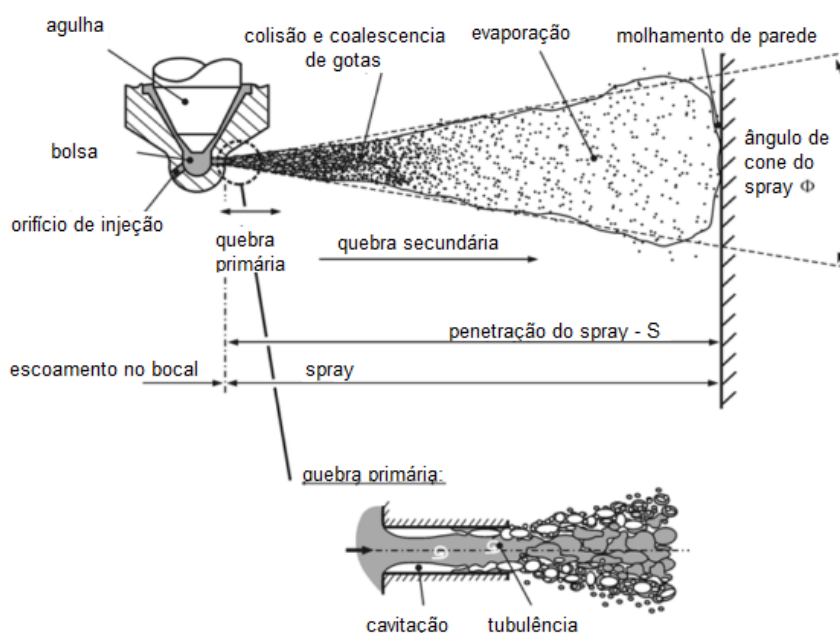


Figura 3.24 – Fenômenos existentes na atomização do combustível. Fonte: adaptado de (Baumgarten, 2006)

As gotas que estão na borda do *spray* sofrem desaceleração por forças aerodinâmicas de uma maneira mais intensa que as localizadas no seu centro, sendo substituídas por novas e aumentando assim a penetração do *spray*. Caso a pressão de injeção seja elevada e de longa duração ou o gás no cilindro tenha baixa densidade, o *spray* pode colidir com a parede, levando à formação de um filme líquido. Esse filme líquido contribui para o aumento das emissões à medida que ele se evapora lentamente e é parcialmente queimado. Em contrapartida, na região densa do *spray*, existe uma alta probabilidade de colisão entre as gotas. A colisão pode resultar em mudança de velocidade, uma vez que essas gotas podem se juntar a uma gota maior (coalescência) ou na divisão em gotas menores (fragmentação) (Baumgarten, 2006).

Dessa interação das gotas do *spray* com a fase gasosa, ocorre a evaporação do combustível, transferindo massa, calor e *momentum* entre as duas fases. Essa interação de fases, importante para o processo de atomização, leva à abordagem Euleriana-Lagrangeana. Os modelos matemáticos utilizados para a reprodução dos fenômenos citados são explicados nos subtópicos seguintes.

3.8.3.1 Quebra Primária

O método de *Blob* foi desenvolvido por Reitz Diwakar, usado para representar a quebra primária das gotas do spray. Esse método se baseia no pressuposto de que a atomização e queda das gotas perto dos orifícios do injetor são processos indistinguíveis devido à alta densidade da região. O detalhado da simulação pode ser substituído pela injeção de grandes gotas esféricas ou "bolhas" com tamanho igual ao diâmetro do orifício do injetor D , e que, por sua vez, estarão sujeitas a uma quebra secundária induzida pelas forças aerodinâmicas, como ilustra a Figura 3.25. O número de gotas injetadas por unidade de tempo é determinado a partir da taxa do escoamento de massa.

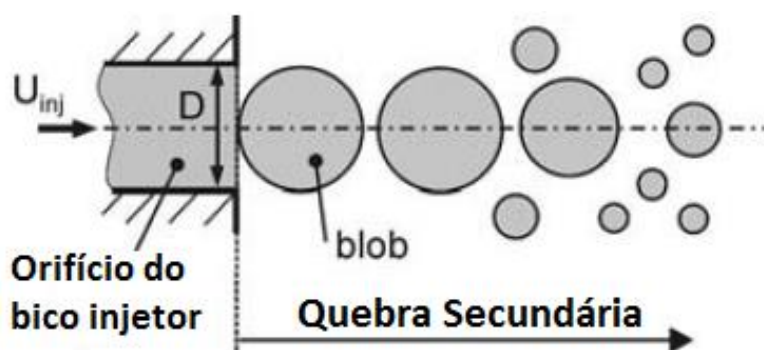


Figura 3.25 – Quebra primária pelo método de *Blob*. Fonte: adaptado de (Baumgarten, 2006)

3.8.3.2 Quebra Secundária

O modelo de Kelvin-Helmholtz (KH) foi proposto por Reitz e baseia-se em uma análise linear de primeira ordem da instabilidade de crescimento de Kelvin-Helmholtz na superfície de um jato líquido cilíndrico com diâmetro inicial r_0 , no qual está penetrando em um gás incompressível e estacionário com velocidade relativa u_{rel} . O líquido e o gás são considerados incompressíveis. Além disso, assume-se que, devido à turbulência gerada no interior do orifício do injetor, a superfície do jato é coberta com um espectro de onda sinusoidal com um deslocamento assimétrico infinitesimal $\eta = \eta_0 e^{\Omega t}$ ($\eta \ll r$). Essas ondas de superfície crescem por causa das forças aerodinâmicas devido à velocidade relativa entre líquido e gás (escoamento de cisalhamento), como mostra a Figura 3.26 (Baumgarten, 2006).

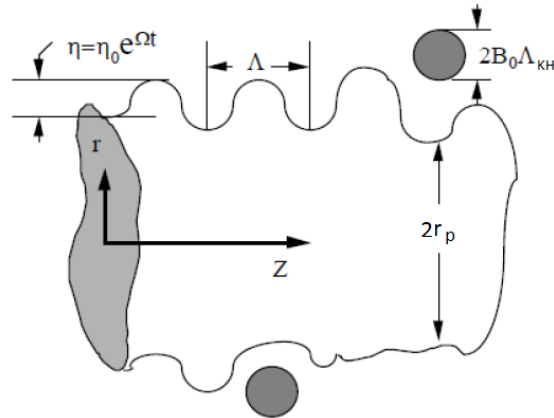


Figura 3.26 - Instabilidade de Kelvin-Helmholtz. Fonte: retirado de (Baumgarten, 2006)

O movimento do líquido e do gás é descrito pela linearização das equações de Navier-Stokes para ambas as fases. A solução é encontrada transformando as equações de movimento do escoamento e funções potenciais. Sendo que a função de dispersão mostra que existe um ponto máximo na curva da taxa de crescimento das ondas. Supondo assim que a onda com maior taxa de crescimento Ω será cisalhada para fora do jato no correspondente comprimento de onda Λ . Essa relação pode ser descrita pela Equação 3.42 e pela Equação 3.43 (3.43 (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017):

$$\Omega_{KH} \left[\frac{\rho_l r_p^3}{\sigma} \right]^{0,5} = \frac{(0,34 + 0,385 We_g^{1,5})}{(1 + Z_l)(1 + 1,4T^{0,6})} \quad (3.42)$$

$$\frac{\Lambda_{KH}}{r_p} = 9,02 \frac{(1 + 0,45Z_l^{0,5})(1 + 0,4T^{0,7})}{(1 + 0,865We_g^{1,67})^{0,6}} \quad (3.43)$$

Nas quais $Z = \frac{\sqrt{We_l}}{Re_l}$ é o número de Ohnesorge, $T = Z_l \sqrt{We_g}$ é o número de Taylor, $We_g = \frac{\rho_g U^2 r_p}{\sigma}$ e $We_l = \frac{\rho_l U^2 r_p}{\eta_l}$ são respectivamente o número de Webber do gás e do líquido, $Re_l = \frac{U r_p}{\nu_l}$ é o número de Reynolds e σ é a tensão superficial do líquido. Sendo também $U = |u_i - v_i|$, onde u_i é a velocidade de fase fluida e v_i é a velocidade da gota. A quebra da gota em outras menores é calculada assumindo que o

raio da gota formada na quebra é proporcional ao comprimento de onda relativo à taxa de crescimento da superfície instável, dada pela Equação 3.44:

$$r_c = B_0 \Lambda_{KH} \quad (3.44)$$

Onde B_0 é uma constante do modelo tipicamente definida para 0,61. Quanto menor o valor de B_0 menor será o tamanho das gotas resultante da quebra. A gota original, também chamada de gota pai, não sofre uma completa desintegração, mas perde massa continuamente na medida em que vai penetrando o gás. A taxa de variação do raio da gota pai na quebra é dada pela Equação 3.45 (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017).

$$\frac{r_p^{n+1} - r_p^n}{dt} = -\frac{(r_p^{n+1} - r_c)}{\tau_{KH}}, \quad (r_c \leq r_p) \quad (3.45)$$

Sendo o tempo de quebra τ_{KH} dado pela Equação 3.46.

$$\tau_{KH} = \frac{3,726 B_1 r_p}{\Lambda_{KH} \Omega_{KH}} \quad (3.46)$$

A constante do tempo de quebra B_1 está relacionada com o nível inicial de perturbação no líquido ao sair do injetor (cavitação), variando em relação ao tipo de injetor usado. Na literatura, encontram-se valores típicos variando de 1,73 a 60 para essa constante (Baumgarten, 2006).

Em adição ao modelo KH, o modelo de Rayleigh-Taylor (RT) é baseado no trabalho teórico de Taylor, que investigou a instabilidade da interface entre dois fluidos de diferentes densidades no caso de uma aceleração (ou desaceleração) normal a esta interface. Se esses dois fluidos são respectivamente um líquido e um gás, a sua interface é estável quando a aceleração é dirigida para o líquido, e perturbações instáveis podem crescer se a aceleração é direcionada para o gás. A gota e gás se movem com velocidade relativa u_{rel} , a desaceleração da gota (na direção para frente) é devida às forças de arrasto, como também pode ser tratada como uma aceleração da gota na direção do escoamento de ar (sentido para trás) (Baumgarten, 2006). Assim, ondas instáveis podem crescer no verso da gota, conforme a Figura 3.27.

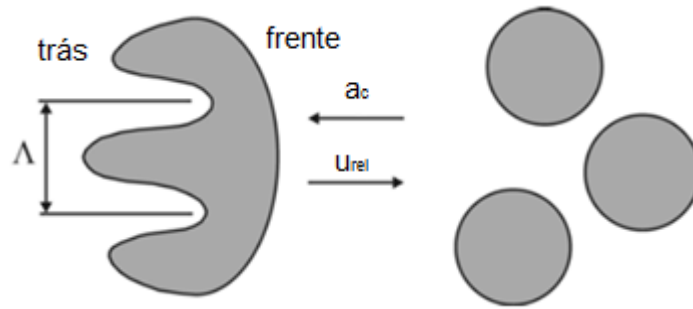


Figura 3.27 – Instabilidade de Rayleigh-Taylor na gota. Fonte: adaptado de (Baumgarten, 2006)

A desintegração da gota em outras menores é devido à força de arrasto aerodinâmico quando a gota é fortemente desacelerada pela a aceleração normal $|a_i|$, podendo ser calculada pela razão da força $F_{D,i}$ pela massa da gota M_d , dado pela Equação 3.47.

$$|a_i| = \frac{F_{D,i}}{M_d} = \frac{3}{8} C_D \frac{\rho_g |u_{rel}|^2}{\rho_l r_0} \quad (3.47)$$

A taxa de crescimento Ω_{RT} (Equação 3.48) e o comprimento de onda Λ_{RT} (Equação 3.49) da instabilidade de RT são dados por:

$$\Omega_{RT} = \sqrt{\frac{2}{3\sqrt{3}\sigma} \frac{[a(\rho_l - \rho_g)]^{3/2}}{\rho_l + \rho_g}} \quad (3.48)$$

$$\Lambda_{RT} = C_3 2\pi \sqrt{\frac{3\sigma}{a(\rho_l - \rho_g)}} \quad (3.49)$$

O comprimento de onda referente à onda de crescimento é maior quando comparado com o diâmetro da gota e, caso seja assumido menor, a onda cresce na superfície da gota. Após o início da instabilidade, o tempo é rastreado e quando atinge o tempo $\tau = C_T / \Omega_{RT}^{-1}$ a quebra da gotícula acontece em menores com raio $r = C_3 * \Lambda_{RT}$. Aumentando este valor, a separação é reduzida e o tamanho das novas gotículas é aumentada. Na literatura, encontram-se valores típicos entre 0,18 e 1,0 para a constante

C₃. A constante C_τ geralmente é igual a 1, mas também permite ajuste para uma quebra mais rápida ou devagar, dada pela Equação 3.50.

O modelo utilizado para a quebra secundária foi a combinação dos dois modelos citados KH-RT. Sendo ele definido pelo comprimento de quebra L_b, dado pela Equação 3.50.

$$L_b = C_b \sqrt{\frac{\pi d_{inj}^2 \rho_l}{4 \rho_g}} \quad (3.50)$$

Assumindo que as instabilidades de KH são responsáveis pela quebra da gota até uma certa distância, L_b, enquanto os dois modelos KH e RT são ativados além do comprimento de rompimento, atuando de forma competitiva, como mostra a Figura 3.28.

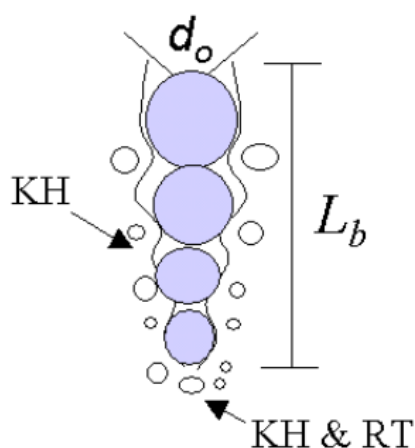


Figura 3.28 – Comprimento de quebra para a atuação do KH-RT. Fonte: retirado de (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017)

3.8.3.3 Arrasto das Gotas

Quando uma gota de líquido entra em um fluxo de gás com um número de Weber suficientemente grande, ela se deforma, não apresentando mais a forma esférica, pois interage com o gás. Portanto, o coeficiente de arrasto deve ser uma função de seu número de Reynolds e da sua amplitude de oscilação também.

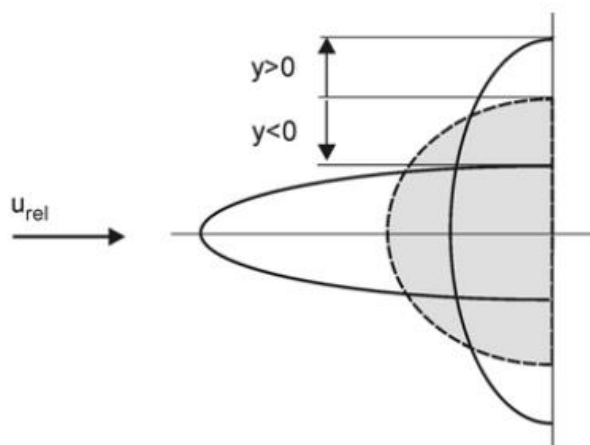


Figura 3.29 – Deformação sofrida pela gota. Fonte: retirado de (Baumgarten, 2006)

Com base nessas observações (Figura 3.29), criou-se o modelo TAB (do inglês, *Taylor Analogy Breakup*) para prever a distorção de gota, y (Equação 3.51), e depois modificaram o coeficiente de arrasto relacionando-o empiricamente com a magnitude da deformação da gota.

$$y = \frac{C_F \rho_g u_{rel}^2}{C_b \rho_l r^2} - \frac{C_k \sigma}{\rho_l r^3} y - C_d \frac{\mu_l}{\rho_l r^2} \frac{dy}{dt} \quad (3.51)$$

Como o coeficiente de arrasto da distorção da gota fica entre a aproximação da gota como uma esfera rígida (limite inferior) e um disco (limite superior), uma expressão linear simples (Equação 3.52) é usada para coeficiente de arrasto dinâmico, C_D .

$$C_D = C_{D,esfera}(1 + 2,632y) \quad (3.52)$$

Da consideração anterior, temos $C_{D,esfera}$ dada pela Equação 3.53.

$$C_{D,esfera} = \begin{cases} 0,424 & Re > 1000 \\ \frac{24}{Re} \left(1 + \frac{1}{6} Re^{2/3}\right) & Re \leq 1000 \end{cases} \quad (3.53)$$

Pode-se notar que no limite de nenhuma distorção ($y = 0$), o coeficiente de arrasto de uma esfera será obtido, enquanto na distorção máxima ($y = 1$) o coeficiente de arrasto correspondente a um disco será obtido. Vale ressaltar que o modelo TAB é utilizado apenas para o cálculo de distorção da gota, não tendo influência a modelagem da quebra. Sendo que as constantes utilizadas no Converge CFD assumem os valores dados na Tabela 3.7.

Tabela 3.7 – Constantes para a distorção da gota. Fonte: retirado de (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017)

C_k	C_d	C_F	C_b
8	5	1/3	1/2

3.8.3.4 Evaporação do Combustível

Além da quebra das gotas do spray e dos processos de mistura de ar e combustível, a evaporação das gotas líquidas também tem uma influência significativa sobre a ignição, combustão e formação de poluentes. A formação de vapor de combustível devido à evaporação é um pré-requisito para as reações químicas subsequentes. Sendo um processo que determina a distribuição espacial da razão de equivalência, e assim afeta fortemente o tempo e a localização da ignição (Baumgarten, 2006).

Sendo utilizada a correlação de Frossling para determinar a taxa de variação do raio da gota, dada pela Equação 3.54 (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017).

$$\frac{dr_0}{dt} = -\frac{\rho_g D}{2\rho_l r_0} B_d Sh_d \quad (3.54)$$

Onde D é a difusividade do vapor líquido descrita pela Equação 3.55 e B_d descrita segundo a Equação 3.56.

$$\rho_{gas} D = 1,293 D_o (T_{gas}/273)^{n_o-1} \quad (3.55)$$

$$B_d = \frac{Y_1^* - Y_1}{1 - Y_1^*} \quad (3.56)$$

Sendo D_o e n_o constantes determinadas experimentalmente, Y_1^* a fração mássica de vapor na superfície da gota, Y_1 a fração mássica de vapor e Sh_d o número de Sherwood dado pela Equação 3.57.

$$Sh_d = (2.0 + 0.6Re_d^{1/2}Sc^{1/3}) \frac{\ln(1 + B_d)}{B_d} \quad (3.57)$$

Onde Re_d e Sc (número de Schimit) são determinadas pela Equação 3.58 e Equação 3.59:

$$Re_d = \frac{\rho_{gas} |u_i + u_i - v_i^1| d}{\mu_{air}} \quad (3.58)$$

$$Sc = \frac{\mu_{air}}{\rho_{gas}} \quad (3.59)$$

Nas quais d é o diâmetro da gota, a μ_{air} viscosidade do ar e a temperatura \hat{T} dada pela Equação 3.60.

$$\hat{T} = \frac{T_{gas} + 2T_d}{3} \quad (3.60)$$

Sendo T_{gas} a temperatura do gás e a T_d a temperatura da gota.

3.8.3.5 Colisão e Coalescência

A colisão de gotas é um efeito importante na região densa do spray, onde o número de gotas por unidade de volume é grande e a probabilidade de ocorrência é alta. As colisões da gota são causadas por diferenças em suas velocidades. Essas diferenças podem surgir de diferenças na velocidade de injeção, a partir de diferentes trajetórias de desaceleração e diferenças de velocidade devido às forças de arrasto, de quebra, turbulência, impacto na parede, dentre outros fatores. O resultado de um evento de colisão depende da energia do impacto, da relação entre os tamanhos das gotas e das condições ambientais, como a densidade do gás, a viscosidade do gás e a relação

combustível-ar dos gases que circundam as gotas durante o impacto, podendo assim, resultar em uma combinação de massas (coalescência), em reflexão ou em quebra dessas gotas. Assim, após a colisão, as trajetórias de velocidade, bem como seus tamanhos e números das gotas, geralmente sofrem alterações. Isso novamente afeta massa, *momentum* e transferência de energia durante a formação da mistura (Baumgarten, 2006).

A colisão pode ser modelada pelo método NTC (do inglês, *No Time Counter*), que é baseado em técnicas de dinâmica dos gases por cálculos de simulação direta de Monte Carlo. Assim, se uma célula contém N gotas que têm a seção transversal de colisão dada por $\sigma_{i,j} = \pi(r_i + r_j)^2$, é esperado que o número de colisões dentro da célula em um intervalo de tempo Δt possa ser somado, resultando na probabilidade de todas as colisões possíveis descrita pela Equação 3.61.

$$M_{coll} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{V_{i,j} \sigma_{i,j} \Delta t}{Vol} \quad (3.61)$$

Ao agrupar as gotas individuais em parcelas N_p que tenham propriedades idênticas, o duplo somatório pode ser reescrito pela Equação 3.62, retirando o fator constante do somatório:

$$M_{coll} = \frac{(qV\sigma)_{max}\Delta t}{2Vol} \sum_{i=1}^{N_p} q_i \sum_{j=1}^{N_p} \frac{q_i V_{i,j} \sigma_{i,j}}{(qV\sigma)_{max}} \quad (3.62)$$

Sendo q o número de gotas numa célula. Ao assumir que um número representativo de parcelas selecionadas de forma randômica represente uma população suficientemente grande, chegamos na aproximação estatística descrita na Equação 3.63.

$$M_{coll} = \sum_{i=1}^{N_p \sqrt{\frac{(qV\sigma)_{max}\Delta t}{2Vol}}} q_i \sum_{j=1}^{N_p \sqrt{\frac{(qV\sigma)_{max}\Delta t}{2Vol}}} \frac{q_i V_{i,j} \sigma_{i,j}}{(qV\sigma)_{max}} \quad (3.63)$$

Essa equação final expressa o método NTC para aplicação em parcelas representando um número variável de gotas. Após uma parcela ser selecionada, um desvio uniforme de

[0,1] é usado para determinar se o par de gotas candidatas realmente colide. Uma colisão ocorre entre as parcelas i e j se o desvio, r , satisfaz a Equação 3.64.

$$r < \frac{q_g V_{i,j} \sigma_{i,j}}{(qV\sigma)_{max}} \quad (3.64)$$

Onde o parâmetro q_g representa o maior número de gotas entre q_i e q_j .

3.8.3.6 Interação das Gotas com a Parede

O modelo do Converge CFD utiliza uma abordagem híbrida para a interação de gotas do líquido com superfícies sólidas. Assim, alguns cálculos assumem quantidades individuais baseadas em partículas, enquanto outros cálculos assumem quantidades baseadas no filme formado. Dessa maneira, a formação do filme pode ser ilustrada na Figura 3.30, onde a espessura do filme h_α na face da parede α , pode ser calculada pela Equação 3.65 (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017).

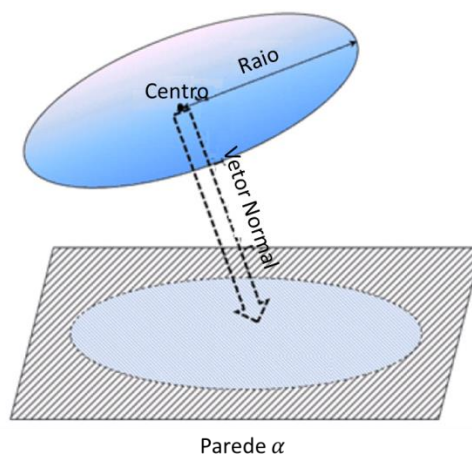


Figura 3.30 - Esquema da formação do filme líquido. Fonte: adaptado de (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017)

$$h_\alpha = \frac{\sum_1^p V_p}{|A_{\alpha,i}|} \quad (3.65)$$

Onde V_p é o volume de todas as gotas p na célula que colidiram com a parede em um dado passo de tempo, $A_{\alpha,i}$ é a área da projeção do vetor na face α . O transporte do

filme líquido é calculado pela equação de *momentum* de filme líquido de O'Rourke e Amsden.

A interação da gota de combustível com as paredes pode ser modelada de seis formas, conforme ilustrada na Figura 3.31, cujos nomes dados para essas formas de interação não serão traduzidos. No caso de *stick*, uma gota com baixa energia cinética adere à parede em forma quase esférica e continua a evaporar. No caso de *spread*, a gota impacta com velocidade moderada em uma parede, espalha-se e, se a parede está seca, formando um filme líquido, e se a parede já está molhada, mistura-se ao filme líquido já formado. No caso de *bounce*, ocorre a reflexão da gota na parede. Esse regime é observado no caso de paredes secas e quentes, onde o contato entre a gota e a parede é impedido por uma almofada de vapor. O *bounce* também ocorre no caso de uma parede úmida, se a energia do impacto é baixa e um filme de ar entre a gota e o filme líquido minimiza a perda de energia. No regime de *boiling-induced break-up*, a gota se desintegra devido à formação de um líquido rápido fervendo em uma parede quente. No caso de *break-up*, a gota se deforma em um filme radial na superfície quente, que se quebra devido à instabilidade induzida por calor. No caso de *splash*, ocorre um impacto de alta energia. Uma coroa é formada, sendo que sua periferia se torna instável e se desintegra em muitas gotas (Baumgarten, 2006).

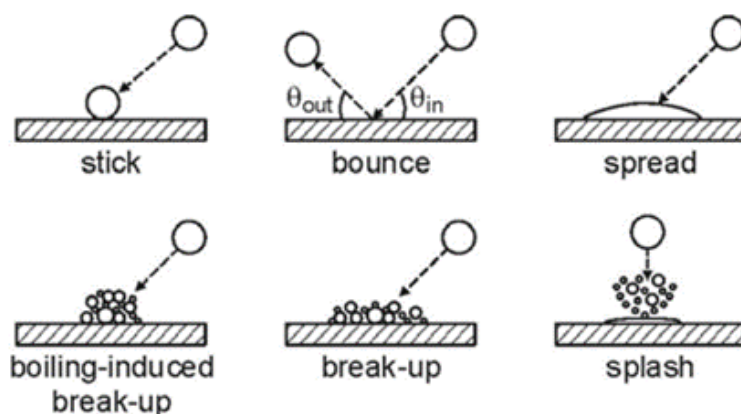


Figura 3.31 - Interação gota-parede. Fonte: retirado de (Baumgarten, 2006)

Sendo que na modelagem da formação do filme, abordou-se o *splash* da gota em uma poça de filme líquido e a remoção do mesmo. O *splash* também foi um modelo

desenvolvido por O'Rourke e Amsden. Nesse modelo, o critério para que ocorra o *splash* é dado pela Equação 3.66.

$$E^2 = \frac{We_i}{\min\left(\frac{h}{d}, 1\right) + \frac{\delta}{d}} > E_{crit}^2 \quad (3.66)$$

Na qual, We_i é o número de Weber da gota calculado pela Equação 3.67, d é o diâmetro da gota que atinge o filme líquido, δ é espessura da camada limite dada pela Equação 3.68.

$$We_i = \frac{\rho_l V_n^2 d}{\sigma} \quad (3.67)$$

$$\delta = \frac{d}{\sqrt{Re_d}} \quad (3.68)$$

Na Equação 3.67, temos que ρ_l é a densidade do líquido, V_n é a componente normal da velocidade da gota em direção à superfície e σ a tensão superficial do líquido. E na Equação 3.69, Re_d é o número de Reynolds da gota e μ_l é a viscosidade do líquido.

$$Re_d = \frac{\rho_l V_n d}{\mu_l} \quad (3.69)$$

Sendo que o valor de E_{crit}^2 sugerido por O'Rourke e Amsden, baseado em trabalhos experimentais é de 3330.

3.8.4 PROCESSO DE COMBUSTÃO

A etapa de combustão inicia-se pelo acionamento da centelha elétrica, onde o potencial entre a abertura dos eletrodos é aumentado até que haja a propagação de correntes ionizantes entre os eletrodos. Essa primeira fase da centelha elétrica é denominada fase de repartição (do inglês, *breakdown phase*). Essa fase é seguida de uma segunda denominada fase do arco (do inglês, *arc phase*), onde o plasma cilíndrico

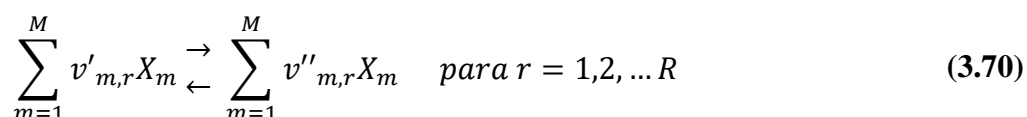
expande-se devido à condução de calor e difusão e, com a inflamabilidade da mistura ar-combustível, as reações exotérmicas iniciam-se e levam a propagação da chama. Seguida pela terceira e última fase, denominada fase de descarga luminosa (do inglês, *glow discharge phase*), onde, dependendo dos detalhes do sistema de ignição, o dispositivo de armazenamento de energia liberará sua energia na descarga do circuito. As escalas de tempo da fase de decomposição são significativamente menores que as fases do arco/descarga luminosa. Na simulação no Converge CFD, essas duas fontes de energia são especificadas separadamente. Desde que o tempo da fase do arco e a fase de descarga luminosa são semelhantes, essa energia é muitas vezes combinada como uma única fonte de energia (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017).

Após a centelha elétrica, inicia-se o processo de combustão, sendo os cálculos do modelo SAGE de química detalhada iniciados neste instante. Para complementar o processo de combustão, também são utilizados dois modelos específicos com o SAGE: o mecanismo de Zel'dovich, para as emissões de NO_x, e o Hiroyasu-NSC, para as emissões de particulado.

3.8.4.1 Química detalhada – SAGE

O modelo de cinética química detalhada SAGE foi desenvolvido por Senecal *et al.* e utiliza o solver CVODES, que é parte do pacote SUNDIALS (do inglês, *SUite of Nonlinear and Differential/ALgebraic equation Solvers*) para a resolução de sistemas de equações diferenciais ordinárias. O SAGE calcula as taxas de reação para cada reação elementar presente no mecanismo cinético químico enquanto o solucionador CFD resolve as equações de transporte (CONVERGE CFD SOFTWARE, 2017).

Assim, as várias etapas do mecanismo cinético químico podem ser escritas pela Equação 3.70.



Na qual os coeficientes $v'_{m,r}$ e $v''_{m,r}$ são os coeficientes estequiométricos dos reagentes e dos produtos para as espécies m e reações r , R é o número total de reações, X_m é o símbolo químico para as espécies m . Sendo o sentido direto da reação

considerado da esquerda para a direita e o indireto da direita para a esquerda. Assim a taxa de produção de espécies m é dada pela Equação 3.71 e Equação 3.72, onde M é o número total de espécies.

$$\dot{\omega}_m = \sum_{r=1}^R v_{m,r} q_r \quad \text{para } m = 1, 2, \dots, M \quad (3.71)$$

$$v_{m,r} = (v''_{m,r} - v'_{m,r}) \quad (3.72)$$

Então, a taxa de progresso definido pelo parâmetro q_r para as reações pode ser escrita pela Equação 3.73.

$$q_r = k_{fr} \prod_{m=1}^M [X_m]^{v'_{m,r}} - k_{rr} \prod_{m=1}^M [X_m]^{v''_{m,r}} \quad (3.73)$$

Onde $[X_m]$ é a concentração molar da espécie m , k_{fr} e k_{rr} são respectivamente o coeficiente de velocidade de reação direto e reverso, sendo o k_{fr} já dado na Equação 3.10. Esses coeficientes podem se relacionar como na Equação 3.74, sendo o coeficiente de velocidade de equilíbrio k_{cr} descrito na Equação 3.75.

$$k_{rr} = \frac{k_{fr}}{k_{cr}} \quad (3.74)$$

$$k_{cr} = k_{pr} \left(\frac{P_{atm}}{RT} \right)^{\sum_{m=1}^M v_{mr}} \quad (3.75)$$

Sendo P_{atm} a pressão atmosférica, R a constante universal dos gases, T a temperatura e k_{pr} a constante de equilíbrio dada pela Equação 3.76.

$$k_{pr} = \exp \left(\frac{\Delta S_r^0}{R} - \frac{\Delta H_r^0}{RT} \right) \quad (3.76)$$

O Δ é o símbolo que representa a mudança que ocorre durante a transformação dos reagentes em produtos para a entropia S_r^0 , e entalpia H_r^0 . Assim, com base nas

informações apresentadas, a equação da conservação de massa e conservação de energia podem ser calculadas, respectivamente, pela Equação 3.77 e a Equação 3.78.

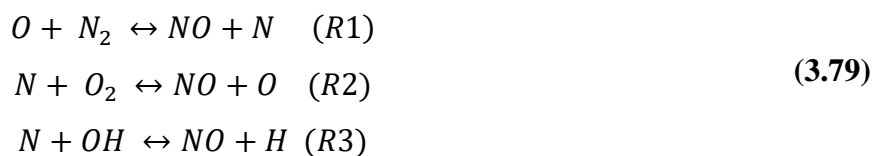
$$\frac{d[X_m]}{dt} = \dot{\omega}_m \quad (3.77)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\frac{\dot{Q}}{V} - \sum_m(\bar{h}_m \dot{\omega}_m)}{\sum_m([X_m] \bar{c}_{p,m})} \quad (3.78)$$

Sendo \dot{Q} a taxa de liberação de calor, V o volume, T a temperatura, P a pressão, \bar{h}_m e $\bar{c}_{p,m}$ respectivamente a entalpia específica do molar e o calor específico a pressão constante para a espécie m . As equações acima são resolvidas em cada passo de tempo computacional e as espécies são atualizadas apropriadamente.

3.8.4.2 Mecanismo de Zel'dovich

O mecanismo estendido de Zel'dovich é usado para calcular a formação de NO. Esse mecanismo é descrito pelas seguintes reações químicas (Equação 3.79):



Onde as constantes de reação R1, R2 e R3, direta (pelo símbolo f) e reversa (pelo símbolo r) podem ser descritas pela Equação 3.80.

$$\begin{aligned} k_{r1,f} &= 7,6 \times 10^{13} \exp(-38000/T) \\ k_{r1,r} &= 1,6 \times 10^{13} \\ k_{r1,r} &= 6,4 \times 10^9 T \exp(-3150/T) \\ k_{r2,f} &= 1,5 \times 10^9 T \exp(-19500/T) \\ k_{r3,r} &= 4,1 \times 10^{13} \\ k_{r3,f} &= 2,0 \times 10^{14} \exp(-23650/T) \end{aligned} \quad (3.80)$$

Assumindo o equilíbrio químico, podemos escrever a taxa de formação de NO pela Equação 3.81.

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{2R_1 [1 - ([NO]/[NO]_e)^2]}{1 + ([NO]/[NO]_e)R'} \quad (3.81)$$

Onde R' , R_1 , R_2 e R_3 podem ser escritas na Equação 3.82 e na Equação 3.83:

$$R' = \frac{R_1}{R_2 + R_3} \quad (3.82)$$

$$\begin{aligned} R_1 &= k_{R1,r} [NO]_e [N]_e \\ R_2 &= k_{R2,f} [N]_e [O_2]_e \\ R_3 &= k_{R3,f} [N]_e [OH]_e \end{aligned} \quad (3.83)$$

Sendo o subscrito e usado para representar a concentração das espécies no equilíbrio químico.

3.8.4.3 Emissões de Particulados – Hiroyasu -NSC

Idealizado por Hiroyasu e Kadota em 1976, onde a produção de massa de particulados M_s (g) dentro de uma célula computacional pode ser determinada em etapa única de competição entre a taxa de formação de massa do particulado \dot{M}_{sf} e a taxa de oxidação dessa massa de particulado \dot{M}_{so} relacionada pela Equação 3.84.

$$\frac{dM_s}{dt} = \dot{M}_{sf} - \dot{M}_{so} \quad (3.84)$$

Onde taxa de formação de massa do particulado é descrita pelas Equação 3.85 e Equação 3.86.

$$\dot{M}_{sf} = \dot{SF} M_{form} \quad (3.85)$$

$$SF = A_{sf} P^{0,5} \exp(-E_{sf}/R_u T) \quad (3.86)$$

Onde M_{form} é a massa das espécies formada de particulados (tipicamente vapor de combustível), P é a pressão da célula, R_u é a constante universal de gás, T é a temperatura da célula, E_{sf} é a energia de ativação e A_{sf} é o Fator pré-exponencial de Arrhenius. Em complemento, para modelar a oxidação do particulado, o Converse CFD usa o modelo NSC (*Nagle and Strickland-Constable*). Este modelo considera que a oxidação de carbono ocorre por dois mecanismos. As taxas desses mecanismos dependem da química de superfície envolvendo a diferença dos locais mais reativos A para os locais menos reativos B. Neste modelo, a taxa de reação líquida R_{total} é dada pela Equação 3.87.

$$R_{total} = \left(\frac{K_A P_{O_2}}{1 + K_z P_{O_2}} \right) X + K_B P_{O_2} (1 - X) \quad \left(\frac{mol}{cm^2 s} \right) \quad (3.87)$$

Onde a proporção do lado mais reativo A é definida como na Equação 3.88:

$$X = \frac{P_{O_2}}{P_{O_2} + (K_T/K_B)} \quad (3.88)$$

E assumindo que o particulado formado apresente uma forma esférica e uniforme, temos sua área S para a oxidação definida pela Equação 3.89.

$$S = N_{p,soot} \pi D_s^2 = \frac{6M_s}{\rho_s D_s} \quad (3.89)$$

Na qual $N_{p,soot}$ é o número total de esferas, D_s é o diâmetro nominal, M_s é a massa e ρ_s é a densidade, sendo todos esses termos referentes ao particulado. Então a oxidação dessa massa de particulado \dot{M}_{so} a pode ser escrita como apresentado na Equação 3.90, onde MW_c representa o peso molecular de carbono.

$$\dot{M}_{so} = S \dot{R}_{total} MW_c = \frac{6M_s}{\rho_s D_s} R_{total} MW_c \quad (g/s) \quad (3.90)$$

3.9 ESTADO DA ARTE

Dependendo da complexidade fenomenológica abordada, uma modelagem numérica pode ser viável ou não, dependendo dos recursos computacionais disponíveis, principalmente quando envolvem o processo de combustão. Essas dificuldades com que o processo numérico se depara podem ser sintetizadas em cinco diferentes estágios, como ilustra a Figura 3.32 (Cancino, 2009):

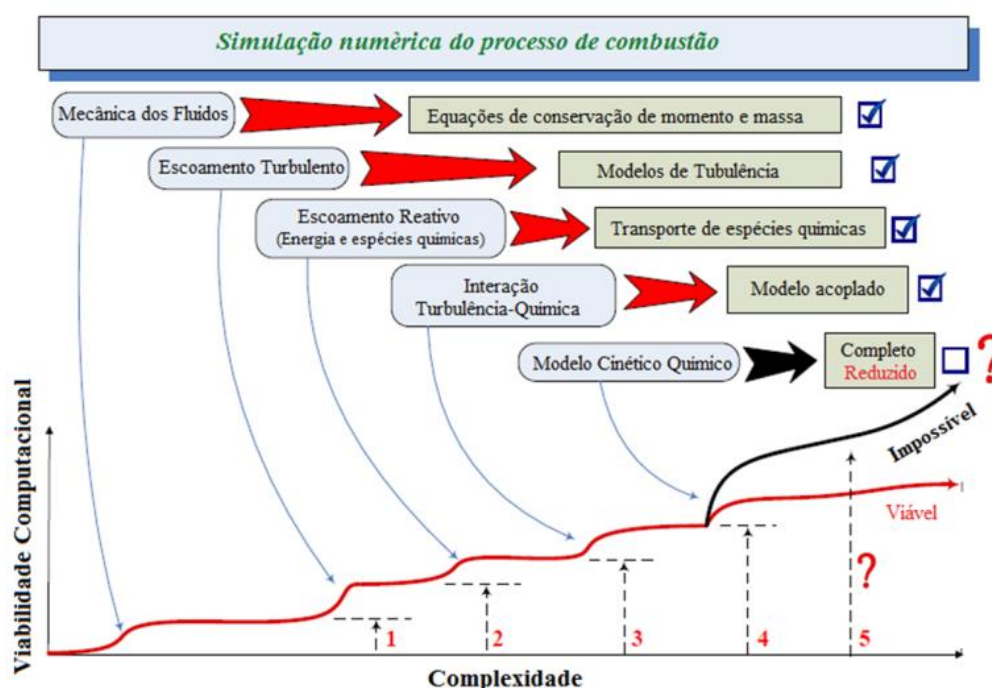


Figura 3.32 – Viabilidade em função da complexidade da simulação numérica do processo de combustão. Fonte: adaptado de (Cancino, 2009)

- O primeiro estágio está relacionado à dificuldade computacional de solucionar as equações de *momentum* e conservação de massa que descrevem o processo.
- O segundo estágio está associado ao regime de escoamento, pois grande parte das aplicações de combustão está no regime turbulento; nesse aspecto, exige a escolha de um modelo de turbulência.

- O terceiro estágio representa o regime de escoamento reativo. Este envolve a solução da equação de conservação de energia e a solução de um conjunto de equações de conservação das espécies químicas presentes no processo de combustão.
- O quarto estágio é a interação da turbulência e da química envolvida no processo, e normalmente está disponível em pacotes comerciais ou códigos abertos de CFD.
- O quinto estágio está relacionado ao modelo cinético químico utilizado para representar formação/consumo de espécies químicas. O modelo de cinética química empregado desempenha um papel importante na viabilidade computacional de uma simulação numérica do processo de combustão. Podendo ele ser principalmente de dois tipos: completo e reduzido. O modelo cinético químico reduzido utiliza um número menor de espécies químicas representativas da combustão, o que torna a simulação numérica, apesar de altamente complexa, viável aos recursos computacionais disponíveis. Quando se utiliza um modelo cinético completo, limita-se a sua viabilidade de acordo com o número de espécies químicas presentes.

Dessa forma, em complemento ao que foi apresentado, esta seção aborda alguns trabalhos da literatura que foram realizados visando a simulação numérica de motores de combustão interna. Essa revisão foi realizada de acordo com os métodos utilizados para o desenvolvimento desse trabalho e dividida em duas partes: simulação unidimensional de motores e simulação tridimensional de motores para a avaliação de mecanismos cinéticos químicos.

3.9.1 MODELAGEM UNIDIMENSIONAL DE MOTORES

(Lanzanova, 2013) investigou experimentalmente e numericamente a injeção de etanol com elevados percentuais de hidratação. Sendo os percentuais em volume de água adicionados ao etanol de 5%, 10%, 20%, 30% e 40%. Ele reproduziu no GT-Power, pelo modelo prescritivo do TPA, a combustão de um motor monocilindro, de

0,668L, com pré-câmara, PFI, operando no ciclo Otto, naturalmente aspirado, de razão volumétrica de compressão de 12:1, a 1800rpm e dois valores de avanço de ignição, um fixo a 6,5° CA e um variável buscando o ponto de MBT. Pelas simulações numéricas, foi possível analisar as vazões mássicas, as pressões em cilindro, a fração de combustível queimado, as temperaturas das zonas queimadas e não queimadas, as temperaturas no cilindro, a taxa de liberação de calor. Ressaltando, assim, a utilização de etanol em alto grau de hidratação como uma alternativa viável para a redução do custo de geração de energia no motor utilizado. Sendo que o aumento do volume de água levou ao aumento da eficiência do motor até o limite de 30% de água.

(Cavadini, 2014) avaliou diferentes configurações para a recirculação dos gases de exaustão, EGR (do inglês, *Exhaust Gas Recirculation*), em um motor diesel, 6 cilindros em linha, turbo alimentado de dois estágios, operando no ciclo Miller. Objetivando a combinação dessas tecnologias para a redução das emissões nesse motor. Utilizando o GT-Power em um modelo completo da configuração do motor para sistemas de EGR ainda não disponíveis. Assim, foram modeladas as eficiências do turbocompressor e em seguida foi possível modelar numericamente diferentes configurações para os caminhos do EGR. Essas diferentes configurações criadas no GT-Power foram comparadas em termos das eficiências do motor, flexibilidades do EGR e desgastes dos componentes. No final, todos esses resultados foram comparados com medidas experimentais do motor.

(Solid, et al., 2015) simularam numericamente, pelo GT-Power, o desempenho de um motor monocilindro de 4 tempos, 110cc, PFI, com o metano como combustível e avaliou o efeito da variação dos tempos das válvulas. Sendo realizadas três análises, a primeira, a verificação do modelo numérico com os dados experimentais para o desempenho desse motor operando com gasolina nas rotações de 2000 a 8000rpm e razões de equivalência de 1,1 e 1,39. A segunda, a comparação desse modelo numérico, operando com metano, nas mesmas condições com os dados obtidos para a gasolina. Por último, o efeito da variação dos tempos das válvulas, com adiantamentos da válvula de admissão de 0° a 40° antes do PMS e de 35° a 75° antes do PMI para a válvula de exaustão. O desempenho do metano foi cerca de 20,0% menor para o torque e BMEP e 12,0% para a pressão máxima no cilindro em relação à gasolina. Nos tempos de abertura das válvulas modelados, o metano apresentou pior desempenho que a gasolina.

(Massom Kumar, 2015) rever esta forma de chamada à referência!! Por que dois nomes??utilizou o GT-Power para fazer uma análise preditiva de um motor diesel. Para isso, foi modelado primeiramente o injetor de combustível; em seguida, foi realizado um TPA para a verificação dos dados experimentais e aquisição de dados complementares. Por último, foi criado um modelo preditivo de combustão, analisando o cilindro para três condições de operações: 1200rpm, 9,27% carga e 40% de EGR; 2250rpm, 56,66% de carga e 13,43% de EGR; 2500rpm, 100% de carga e sem EGR. O desempenho do modelo preditivo totalmente calibrado foi avaliado, analisando sua capacidade de prever os principais parâmetros operacionais, como IMEP, MBT 50, pressão máxima no cilindro e NOx. O modelo foi capaz de prever os principais parâmetros operacionais dentro dos limites simulados, exceto o NOx em baixas cargas e baixas velocidades e pressão máxima no cilindro em altas cargas e altas velocidades.

(Lago Sari, 2017) rever esta forma de chamada à referência!! Por que dois nomes??realizou ensaios experimentais em um motor monocilindro Agrale M90, de duas válvulas, com o volume deslocado de 0,668L, PFI e ignição por centelha. Foi avaliada a adição de água no etanol nas proporções de 4%, 10%, 20% e 30% de água. Os ensaios foram realizados na condição de MBT para o avanço de ignição, em três razões volumétricas de compressão de 12,5:1; 13,5:1 e 14,5:1, nas cargas de 6 bar e 8 bar e nas rotações de 1600, 1800 e 2000rpm, para cada uma das 4 composições de combustível. Com base nos dados experimentais, foi realizado o cálculo da velocidade de chama laminar pelo programa Chen-1D. Com o GT-Power, verificou as condições de ensaio pelo TPA, e seus resultados foram acoplados com o programa CANTERA para a investigação do efeito do aumento da concentração de água sobre o tempo de indução.

(Gervasio, 2017) descreveu uma metodologia de correlação e análise para o GT-Power, ressaltando seu uso como ferramenta no desenvolvimento do projeto de motores e auxílio para simulações CFD 3D. Em seu trabalho, foi modelado um motor multicomcombustível, ciclo Otto, 4 cilindros em linha, operando com o E22. Essa metodologia pode ser dividida em duas etapas e os resultados obtidos serviram de base para o desenvolvimento de um motor sobrealimentado via turbo compressor. Em um primeiro momento, foi calibrado pelo modelo prescritivo, os expoentes de Wiebe, variando sua rotação de 1500 a 6250 rpm, totalizando 20 rotações avaliadas. Nessa primeira etapa, foi obtido uma boa correlação com medidas experimentais, cujas diferenças percentuais eram inferiores a 3% na maioria das condições modeladas. Em

seguida, foi implementado um modelo preditivo de chama turbulenta para prever o comportamento do motor. Para isso, foi necessária a realização de um DoE (do inglês, *Design of Experiments*) para determinar alguns parâmetros da chama turbulenta. Esse modelo preditivo foi capaz de prever a combustão e ainda permitiu a detecção de casos de detonação no motor.

3.9.2 MODELAGEM TRIDIMENSIONAL DE MOTORES COM O USO DE MECANISMOS CINÉTICOS QUÍMICOS

(Ra, et al., 2011), partindo da composição de n-tetradecano, tolueno, ciclohexano, éter dimetílico, etanol e butanoato de metila, desenvolveram um mecanismo cinético químico multicomponente composto de 113 espécies e 487 reações. Esse mecanismo foi inicialmente validado com dados experimentais de atraso de ignição e previsões de outros mecanismos da literatura e desenvolvido para prever a combustão de motores HCCI e DI. Foram realizadas duas simulações com esse mecanismo em condições de operação do motor. A primeira, bidimensional, no programa Kiva para um motor HCCI, correlacionando bem as pressões no cilindro e a taxa de liberação de calor. A segunda, tridimensional, de um motor diesel, DI, simulando somente 1/7 do cilindro, no total de 10.470 células, operando a baixa temperatura.

(Hindi, 2011), investigou a formação de mistura e combustão de um motor monocilindro, de 2L de volume deslocado, razão volumétrica de compressão de 14,0:1, 4 válvulas, DI, em ciclo Otto, carga parcial, a 1200rpm, operando com uma mistura estratificada com gasolina e com etanol. Em seu trabalho, foi utilizado o programa Converge CFD para a realização das simulações numéricas. A sensibilidade de malha foi avaliada em relação ao AMR na região de maior gradiente de temperatura, considerando os tamanhos mínimos de 0,125mm e 0,25mm. Os dois refinamentos apresentaram bons resultados sendo o AMR de 0,25mm selecionado para minimizar os custos computacionais. O mecanismo cinético para a gasolina era composto de isoocatano 38 espécies e 69 reações e o do etanol com 38 espécies e 228 reações. Para as simulações com a gasolina, foram avaliados o impacto do nível de turbulência induzida pelo *squish* para a formação da mistura e dois tipos de injetores para alcançar maiores valores de IMEP. Também foi comparado o motor operando com gasolina, e operando a

etanol para o IMEP, pressão e temperaturas no cilindro, taxa de liberação de calor, e emissões de CO, HC, Nox e particulados para esses dois combustíveis.

(Wang, et al., 2012), analisaram numericamente a combustão e a formação de NOx no diesel e biodiesel. O mecanismo cinético químico para o diesel foi desenvolvido pela Chalmers University of Technology e era composto de n-Heptano. Já o mecanismo reduzido para o biodiesel de 89 espécies e 364 reações era composto de decanoato de metila, metil-9-decenoato e n-heptano. O programa Converge CFD foi utilizado para as simulações tridimensionais. O modelo KH-RT foi selecionado para a quebra secundária das gotas e o tamanho da malha base foi de 1,4mm com refinamentos fixos com o tamanho mínimo de 0,35mm. Todas as simulações foram iniciadas no fechamento da válvula de admissão, com o motor operando entre 2,5 a 10 bar de BMEP e com injeções de combustível entre 0° a 10° antes do PMS. As simulações tiveram bons resultados para a curva de pressão no cilindro, a taxa de liberação de calor e emissões de NOx de forma qualitativa e quantitativa com o motor. Portanto, validando esses mecanismos cinéticos.

(Maghbouli, et al., 2013), modelaram um motor diesel, turbo alimentado, com 4 cilindros em linha, razão volumétrica de compressão de 18,5:1, nas rotações de 1200, 2400 e 3600 rpm com cargas de 100% e 50%. O código de CFD utilizado foi o Kiva-4 acoplado com o Chemkin com um mecanismo multicomponente composto de n-Heptano e Tolueno, possui 72 espécies e 325 reações elementares. O comportamento desse mecanismo foi comparado com ensaios experimentais e com um mecanismo composto somente de C₁₄H₂₈, tendo sido modelado somente 60° do cilindro. O mecanismo multicomponente apresentou melhores resultados de pressão no cilindro e da taxa de liberação de calor que o mecanismo composto somente de C₁₄H₂₈. Assim como possibilitou a avaliação das temperaturas no cilindro, a formação de NOx, CO, CO₂ para o mecanismo multicomponente, como também o efeito das condições de operação na formação desses poluentes.

(Duyar, 2014) simulou um cilindro do motor Diesel, multicilindro Scania D12, a 1200 rpm, razão volumétrica de compressão de 14,8:1, 14% de EGR, no programa AVL FIRE 2013.1. No entanto, foi modelado somente ¼ do cilindro. Esse trabalho comparou a modelagem da combustão pelo modelo de equilíbrio químico ECFM-3Z contra seis diferentes mecanismos cinéticos químicos da literatura, sendo eles: um mecanismo simplificado (9 espécies e 4 reações), o mecanismo de Wisconsini (29 espécies e 52

reações), o mecanismo de Tsurushima (34 espécies e 39 reações), o mecanismo de Pitsch (44 espécies e 112 reações), o mecanismo de Lulaw (68 espécies e 283 reações) e o mecanismo de Golovitchev (82 espécies e 334 reações). O mecanismo simplificado falhou para detectar a autoignição do combustível. O tempo de simulação foi dependente do tamanho do mecanismo, sendo em ordem crescente de tempo: mecanismo simplificado, ECFM-3Z, mecanismo de Tsurushima, mecanismo de Wisconsini, sendo o tempo dobra em relação ao mecanismo de relação a Wisconsini para o mecanismo de Pitsch, dobrando também em relação ao Pitsch para o mecanismo de Lulaw e por último o mecanismo de Golovitchev.

(Huang, 2014), desenvolveu um mecanismo para a gasolina de 120 espécies e 677 reações composto de Isooctano, Tolueno e n-Heptano, validado para atraso de ignição e velocidade laminar de chama na com e sem EGR. Esse mecanismo também foi validado em simulações numéricas no programa livre OpenFOAM. O motor utilizado para a aquisição de dados experimentais foi um monocilindro de pesquisa AVL 5411.018, DI, operando em carga estratificada, duas composições de mistura com λ de 2,6 e 1,85, na rotação de 1500 rpm e três condições de IMEP, sendo elas: 3,6; 3,8 e 5bar. O modelo numérico prevê bem a pressão no cilindro, porém ele ainda necessita de algumas melhorias.

(Battistoni, et al., 2015) baseados em ensaios experimentais de um motor monocilindro de pesquisa, a centelha elétrica, 4 válvulas, com acesso óptico, pistão reto, PFI, a 900 rpm, e composições de mistura com λ de 0,9; 1,0 e 1,1; simularam no programa Converge CFD, nessas condições, dois combustíveis: a gasolina e o etanol. O mecanismo utilizado para a gasolina foi um RPF de 48 espécies e 152 reações e para o etanol um mecanismo de 107 espécies e 2642 reações. O teste de sensibilidade de malha foi realizado em função do AMR, com valores máximos de refinamento de 1mm; 0,75mm e 0,25mm. Devido ao custo computacional demandado pelo refinamento de 0,25mm, foi utilizado nas simulações o de 0,75mm. Os resultados indicam que as simulações foram capazes de prever dados experimentais com alta precisão, como também as variações devido à mudança de tipo de combustível e razão ar-combustível foram bem capturadas.

Dessa forma, pelos estudos apresentados, podemos ressaltar dificuldades em relação ao limite computacional em simulações de motores com mecanismos cinéticos químicos. Principalmente pela prática de simular uma fração do cilindro para reduzir

essa complexidade. Em síntese, a Tabela 3.8 lista esses trabalhos destacando os mecanismos utilizados, o ano e o código ou programa utilizado.

Tabela 3.8 – Relação de alguns trabalhos na avaliação de mecanismos cinéticos

Referência	Reações	Espécies	Motor	Código
(Ra, et al., 2011)	113	487	Diesel, sendo simulado 1/7 do cilindro	Não informado
(Hindi, 2011)	38 38	69 228	DI, ciclo Otto, com gasolina e etanol	Converge CFD
(Wang, et al., 2012)	89	364	DI, com Biodiesel	Converge CFD
(Maghbouli, et al., 2013)	72	325	Diesel, sendo simulado 60° do cilindro	Kiva-4
(Duyar, 2014)	9 29 34 44 68 82	4 52 39 112 283 334	Diesel, sendo simulado ¼ do cilindro	AVL FIRE 2013.1
(Huang, 2014)	120	677	Monocilindro, DI e operando com gasolina	OpenFOAM
(Battistoni, et al., 2015)	48 107	152 2642	Monocilindro, PFI, ciclo Otto, operando com gasolina e etanol	Converge CFD

3.10 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A revisão bibliográfica foi pautada no sentido de mostrar os processos internos de um motor de combustão interna por centelha. Foram identificadas as diferenças entre ciclo teórico Otto e o ciclo real ou indicado, assim como a descrição de cada um desses ciclos. As características e o processo produtivo dos combustíveis utilizados nesse trabalho: a Gasolina e o Etanol. Em seguida, foi explicada a formação da mistura ar-combustível que interfere significativamente no processo combustão e o modelamento desse processo, ressaltando também as dificuldades em representá-los por mecanismos cinéticos químicos, principalmente quando se descreve as reações químicas representativas da gasolina. Também foram identificadas a modelagem dos processos existentes no motor por duas abordagens: a unidimensional e a tridimensional, salientando a base de seus equacionamentos, custos computacionais e alguns trabalhos

publicados neste âmbito. No Capítulo 4, apresenta-se a metodologia de trabalho desenvolvida, baseada no que foi abordado nessa revisão.

4 METODOLOGIA

Dentro do conceito do programa Inovar Auto, surgiu o Programa de Residência Tecnológica para Engenheiros, que tem como objetivo a pesquisa e o estímulo à inovação através da parceria com estudantes bolsistas, nível mestrado, com dedicação exclusiva ao tema, para atuarem junto aos profissionais de engenharia no desenvolvimento de pesquisas em temas no portfólio de projetos correntes da Fiat Chrysler Automobiles (FCA) (de Souza, et al., 2016).

Esse trabalho é consequência da posição inovadora da FCA e envolveu diretamente quatro bolsistas de mestrado, sendo os seus trabalhos relacionados. Os mecanismos cinéticos químicos aqui validados foram desenvolvidos por Cota (Cota, 2018). A validação aqui desenvolvida serviu de base para os trabalhos de Braga (Braga, 2018) e de Martins (Martins, 2018) na análise detalhada de motores de combustão interna dos fenômenos de detonação e emissões de poluentes, respectivamente.

Dessa forma, a metodologia desse trabalho pode ser dividida em grandes etapas, como ilustrado na Figura 4.1. Iniciou-se pela aquisição dos dados experimentais, pela equipe experimental do Centro de Tecnologia da Mobilidade (CTM-UFMG) e, em paralelo, realizou-se o cálculo numérico do coeficiente de descarga das válvulas. Esses dados foram utilizados para a elaboração do modelo unidimensional no GT-Power. Essa etapa é importante, pois em alguns casos é impossível ou extremamente oneroso a aquisição experimentalmente de alguns dados através de ensaios de bancada.

Os dados de saída da simulação unidimensional são os de entrada para a simulação tridimensional. Em conjunto, realizou-se um estudo das constantes do modelamento da injeção de combustível, valores necessários para a simulação tridimensional. Por último, começou-se de forma interativa a análise dos mecanismos cinéticos químicos desenvolvido por Cota (COTA, 2018), sendo apresentado em detalhes os dois últimos mecanismos, visto que os primeiros desenvolvidos apresentaram um comportamento abaixo do desejável.

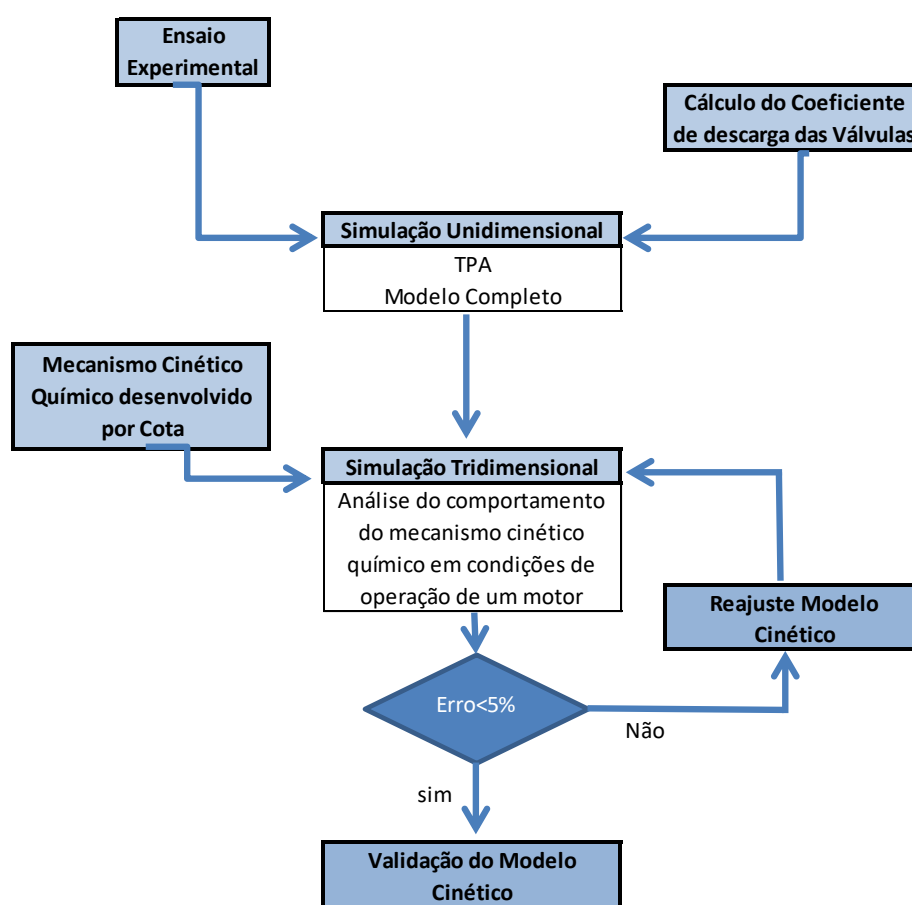


Figura 4.1 - Esquema geral da metodologia de trabalho. Fonte: Autor

Esses dois mecanismos cinéticos químicos, sendo o primeiro de 75 espécies e 343 reações químicas elementares e o segundo com 115 espécies e 639 reações químicas elementares, são avaliados em duas etapas. Na primeira etapa, avaliou-se, por meio de simulações numéricas tridimensionais, o comportamento desses dois mecanismos cinéticos químicos em relação ao mecanismo cinético químico referenciado na literatura de Abianeh (ABIANEH, ET AL., 2015), que possui 66 espécies e 215 reações químicas elementares.

O comportamento desses três mecanismos são avaliados para uma mesma rotação carga e combustível em comparação aos dados experimentais ou aos dados das simulações unidimensionais no GT-Power, quando esses valores não puderam ser obtidos experimentalmente. Os dados numéricos, resultados das simulações unidimensionais, serão nesse trabalho referenciados como GT-Power, a fim de simplificar a nomenclatura.

Na segunda etapa, é selecionado, entre os dois desenvolvido por Cota, o mecanismo de melhor desempenho para a avaliação do seu comportamento em relação a quatro diferentes combustíveis numa mesma condição de operação. De maneira análoga à primeira etapa, seu comportamento é avaliado por meio de simulações numéricas tridimensionais e comparado a dados experimentais e a simulações unidimensionais no GT-Power.

Assim, os próximos subtópicos explicarão de forma mais detalhada os combustíveis utilizados, o motor e as condições de operação selecionadas, as etapas da metodologia numérica unidimensional e as etapas da metodologia numérica tridimensional.

4.1 COMBUSTÍVEIS UTILIZADOS

Este trabalho visa a validação de um mecanismo cinético químico reduzido para a mistura de gasolina e etanol. Foram utilizadas diferentes misturas de Etanol Anidro com Gasolina Padrão L6 (E10, E22, E50, E85) e Etanol Hidratado com 4,0% em volume de água (E100). As simbologias E10, E22, E50 e E85 representam, pelo seu número, a porcentagem em volume de etanol anidro adicionado à gasolina, ou seja, no E10 adicionou-se 10% de etanol anidro na gasolina padrão L6, no E22 foram 22% de etanol anidro, no E50 foram 50% de etanol anidro e no E85 foram 85% de etanol anidro.

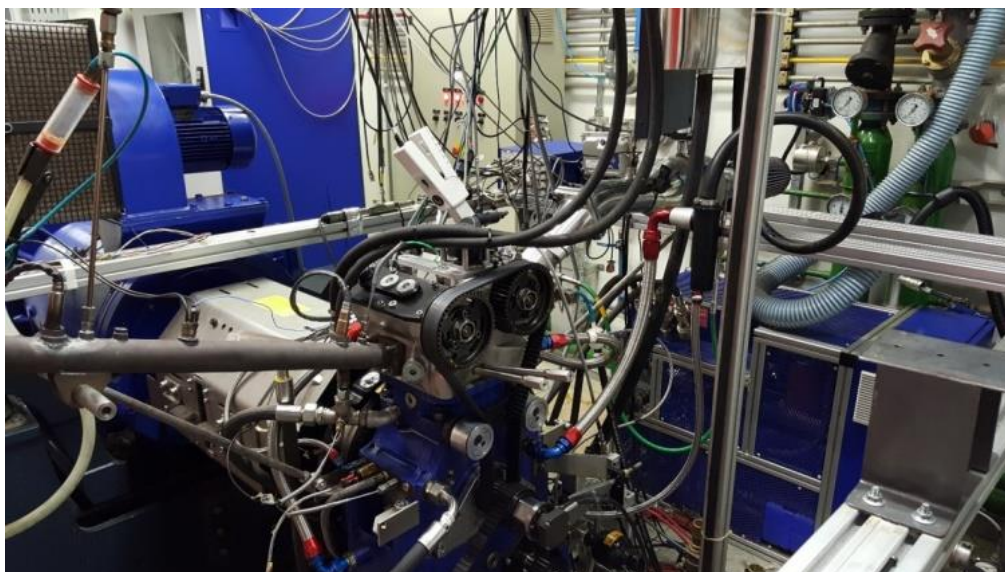
Realizou-se também uma análise química da Gasolina Padrão L6, e, com base nesse resultado, em relação à família dos componentes mais representativos, definiu-se a composição da gasolina como uma mistura de n-Heptano [$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_5\text{CH}_3$], Iso-octano [$\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_3$], Tolueno [$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$] e Hepteno [$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}=\text{CH}_2$]. Essa composição serviu de base para a criação do mecanismo cinético químico que foi reduzido e avaliado neste trabalho. A Tabela 4.1 mostra a composição em volume dos combustíveis utilizados nas simulações unidimensionais e tridimensionais em relação à composição que foi definida para a gasolina.

Tabela 4.1 – Composição volumétrica dos combustíveis utilizados. Fonte: Autor

Componente	Fração Volumétrica				
	E10	E22	E50	E85	E100
n-Heptano	11,03	9,56	6,13	1,84	0,00
Iso-octano	25,75	22,31	14,30	5,29	0,00
Tolueno	35,73	30,96	19,85	5,95	0,00
Hepteno	17,49	15,16	9,72	2,91	0,00
Etanol	10,00	22,00	50,00	85,00	96,00
Água	0,00	0,00	0,00	0,00	4,00
Total	100,00	100,00	100,00	100,00	100,00

4.2 OBJETO DE ESTUDO: MOTOR UTILIZADO

O motor utilizado para os ensaios experimentais foi o motor Monocilindro de Pesquisa (SCRE – do inglês, *Single Cylinder Research Engine*), portando 4 válvulas, naturalmente aspirado e que utiliza um sistema de injeção direta, com o injetor multifuros modelo Bosch HDEV 5.1. A Figura 4.2 mostra a imagem do motor.

**Figura 4.2 – Imagem do SCRE. Fonte: CTM-UFGM**

O motor apresenta duas válvulas de admissão e duas de exaustão e possui razão volumétrica de compressão variável. Neste trabalho são utilizadas as razões de 11,5:1 e 12:1. As especificações do motor encontram-se descritas na Tabela 4.2:

Tabela 4.2 - Características do SCRE. Fonte: Autor

Parâmetro	Descrição
Motor	AVL 5496 - Monocilíndrico
Volume deslocado	454,16 cm ³
Curso	86 mm
Diâmetro	82 mm
Comprimento da Biela	144 mm
Offset no pistão	0,50 mm
Número de Válvulas	4
Cruzamento de Válvulas	0°
Diâmetro da válvula de admissão	33,9mm
Máximo levantamento da válvula de admissão	10,19mm
Duração da admissão	230°
Abertura das válvulas de admissão (IVO)	0° APMS
Fechamento das válvulas de admissão (IVC)	40° DPMI
Diâmetro da válvula de exaustão	28mm
Máximo levantamento da válvula de exaustão	8,83mm
Duração da exaustão	260°
Abertura das válvulas de exaustão (EVO)	56° APMS
Fechamento das válvulas de exaustão (EVC)	0° DPMS
Lubrificação	Óleo mantido constante a 90°C
Arrefecimento	Água a mantida constante a 90°C
Pressão de Injeção do combustível	80bar
Temperatura de Injeção do combustível	20°C

4.3 DOMÍNIO COMPUTACIONAL

O domínio computacional foi obtido a partir dos arquivos CAD (do inglês, *Computer Assisted Design*), contendo a geometria do cabeçote do motor AVL 5496 fornecido pelo fabricante. Já os arquivos referentes aos dutos de admissão e exaustão, além do cabeçote, foram fornecidos pela equipe experimental do CTM-UFGM. A Figura 4.3 mostra a montagem dos arquivos CAD do cabeçote e dutos, e a Figura 4.4, a vista interna do cabeçote.

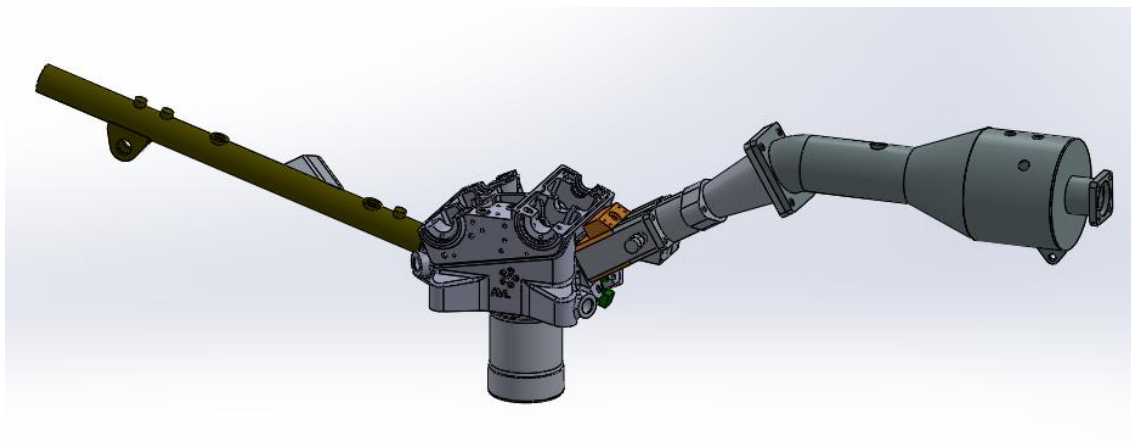


Figura 4.3 – Montagem CAD do cabeçote e de parte dos dutos de admissão e exaustão. Fonte: Autor

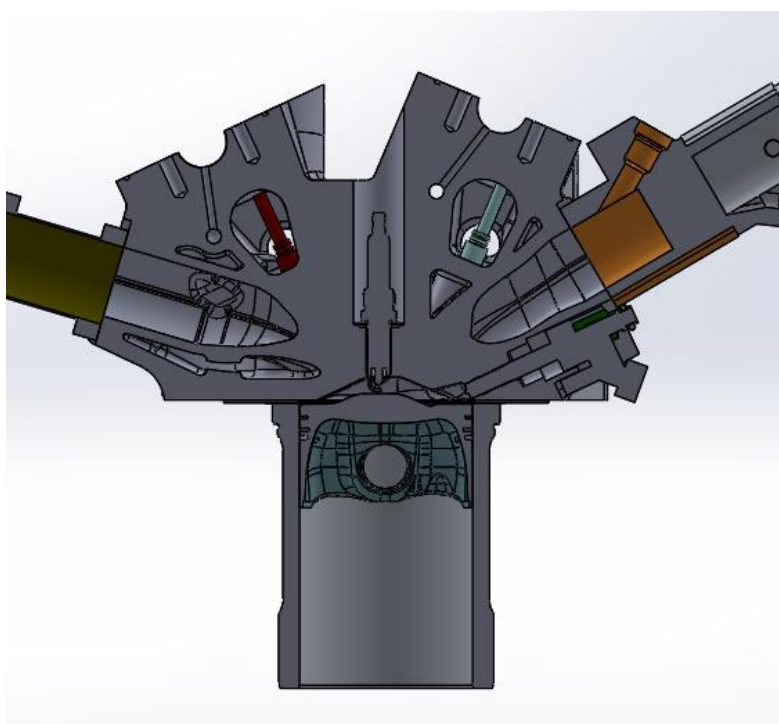


Figura 4.4 – Vista interna do motor. Fonte: Autor

Para modelar numericamente um problema, é necessário extrair o volume interno da geometria do motor, ou seja, o volume referente ao espaço ocupado pelos gases. A extração do volume interno é realizada subtraindo-se o negativo do CAD completo do motor no programa Solidworks. Após a extração desse volume, algumas simplificações foram realizadas. A primeira foi a redução desse domínio até o ponto de aquisição das medidas das pressões instantâneas de admissão e exaustão. Em seguida, os cantos vivos do modelo CAD foram suavizados para melhor criação da malha

superficial e, posteriormente, da volumétrica, cujo objetivo era minimizar potenciais problemas numéricos relacionados à razão de aspecto muito inadequada; a Figura 4.5 e Figura 4.6 mostram o resultado final.

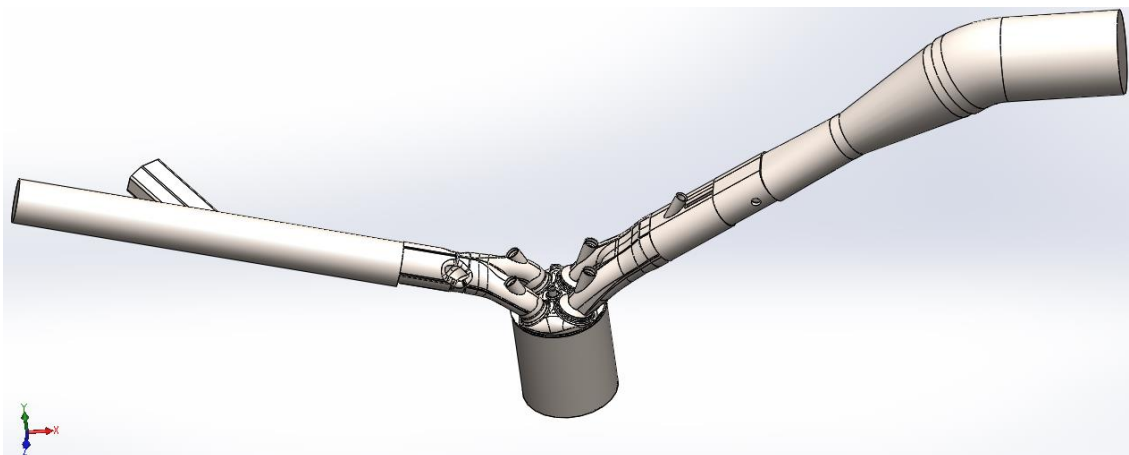


Figura 4.5 – Domínio computacional para as simulações numéricas. Fonte: Autor

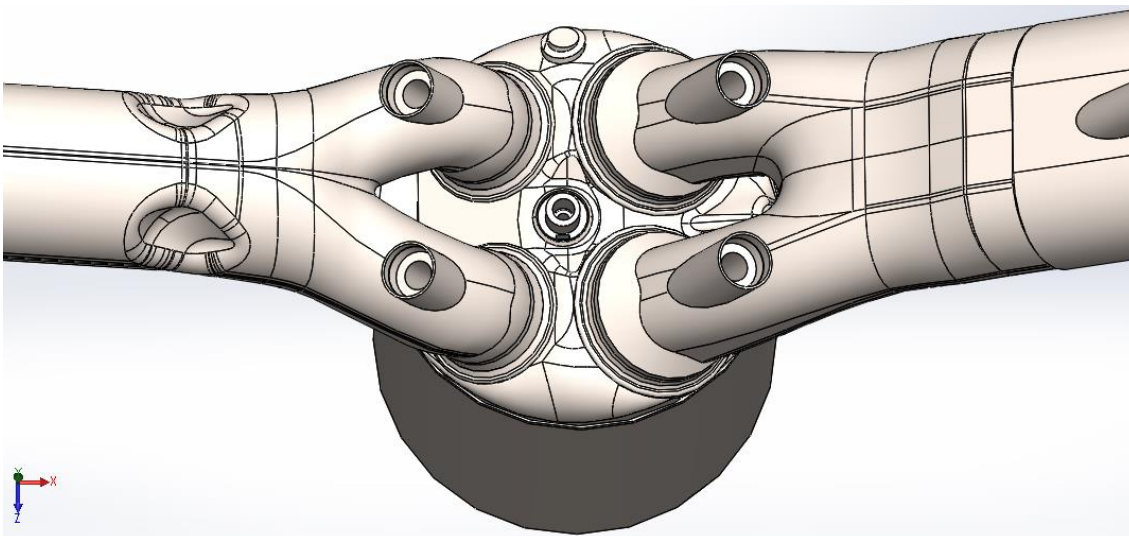


Figura 4.6 – Vista em detalhe do volume interno do cilindro. Fonte: Autor

Nos ensaios experimentais, foram utilizadas duas razões volumétricas de compressão: 11,5:1 e 12,0:0. Para cada uma dessas, o SCRE estava instrumentado com um pistão diferente, como mostra a Figura 4.7. Assim, o negativo de cada pistão foi retirado da geometria da Figura 4.5, resultando no final dois domínios computacionais para cada razão volumétrica de compressão.

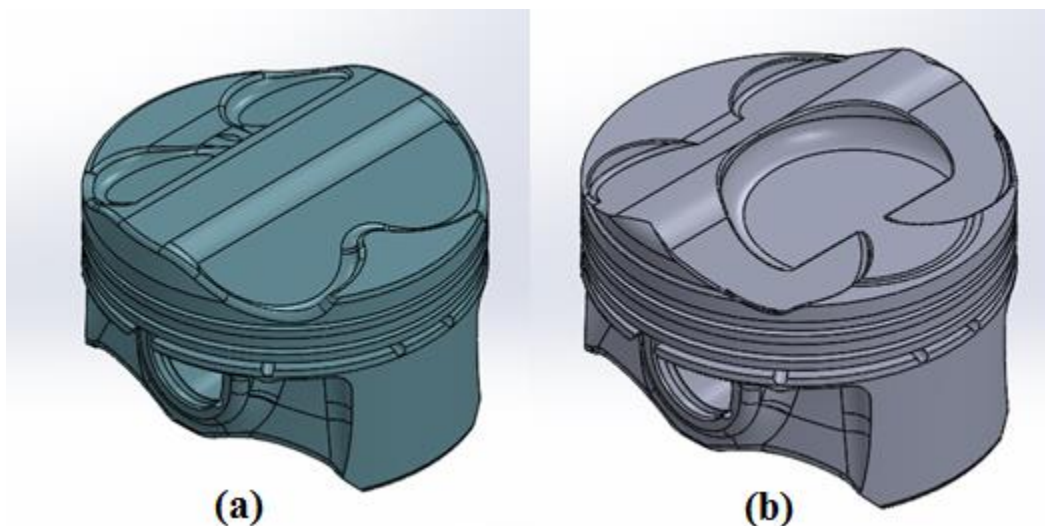


Figura 4.7 – Pistões instrumentados no SCRE: (a) para a razão volumétrica de compressão 11,5:1; (b) para a razão volumétrica de compressão 12,0:1. Fonte:

Autor

4.4 COEFICIENTE DE DESCARGA DAS VÁLVULAS

A vazão mássica foi obtida por meio de simulações numéricas devido à impossibilidade de instrumentar o motor monocilindro para a realização de um ensaio de banco de fluxo e, assim, medir a vazão mássica real. Dessa forma, o domínio computacional, ou seja, a geometria do volume interno mostrado na Figura 4.5 foi adaptada para o teste de coeficiente de descarga.

Para o cálculo da perda de carga relativa às válvulas de admissão, o duto de admissão foi removido e adicionado na extremidade do pórtico de admissão uma semiesfera de raio 250mm. O pistão foi removido para a saída de ar e as paredes do cilindro foram alongadas a um valor referente a dez vezes a medida do diâmetro cilindro. Esse valor garante que o escoamento esteja estabilizado no momento do cálculo da vazão mássica reversa. O duto e o pórtico de exaustão também foram removidos, bem como foi fechada a região referente às válvulas de exaustão. A Figura 4.8 mostra a geometria completa utilizada.

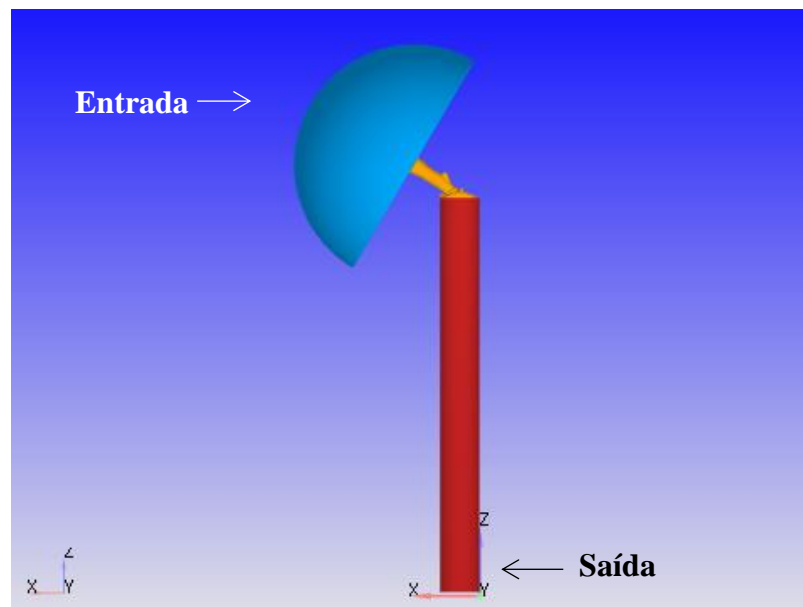


Figura 4.8 – Domínio computacional para simulação do coeficiente de descarga direto das válvulas de admissão. Fonte: Autor

Para a perda de carga relativa às válvulas de exaustão, as mesmas modificações foram realizadas, removeu-se o duto de exaustão e adicionou-se uma semiesfera de raio 250mm no pórtico de exaustão. O pistão, o duto de admissão e o pórtico de admissão também foram removidos, e o cilindro foi alongado a um valor referente a dez vezes o valor do diâmetro. A Figura 4.9 mostra a geometria final.

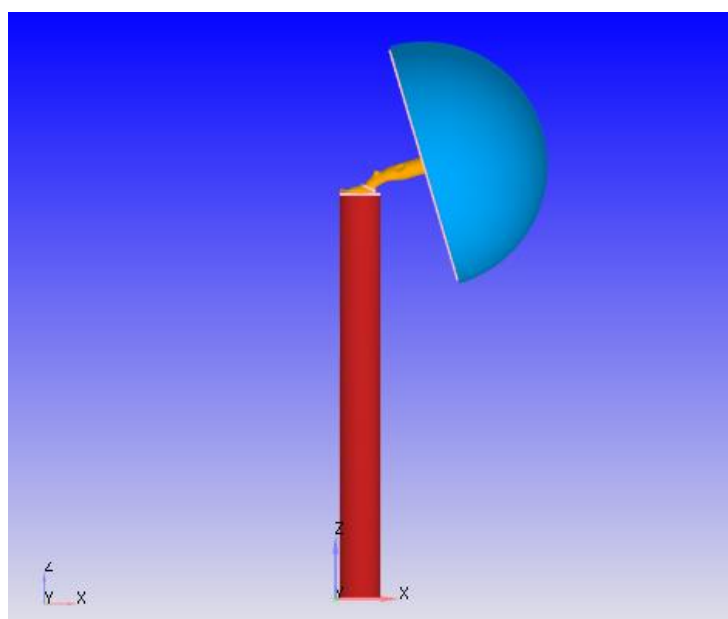


Figura 4.9 - Domínio computacional para simulação do coeficiente de descarga das válvulas de exaustão. Fonte: Autor

Essas simulações foram realizadas no programa Converge CFD. A primeira simulação foi para o coeficiente de descarga direto da válvula de admissão. Assim, no domínio representado na Figura 4.8 é considerado o escoamento de ar à temperatura de 300K, sendo essa mesma temperatura imposta nas paredes do domínio. A semiesfera é considerada a entrada do escoamento a uma pressão de 101325,0 Pa. Para o direcionamento do escoamento, é imposto na saída uma redução de 10% da pressão relativa ao valor de entrada. Definindo-se, assim, na extremidade do cilindro uma pressão de 91192,5 Pa. As válvulas de admissão encontravam-se num levantamento de 1mm, sendo que a simulação durou 10.000 ciclos.

Após os 10.000 ciclos, uma nova simulação era iniciada nas mesmas condições descritas acima, mas com as válvulas se deslocando por mais 1 milímetro e mais uma simulação com 10.000 ciclos era calculada. Esse procedimento foi repetido até que a válvula de admissão atingisse seu levantamento máximo de 10,19mm, totalizando 11 simulações. A Figura 4.10 mostra em detalhe o deslocamento da válvula de admissão.

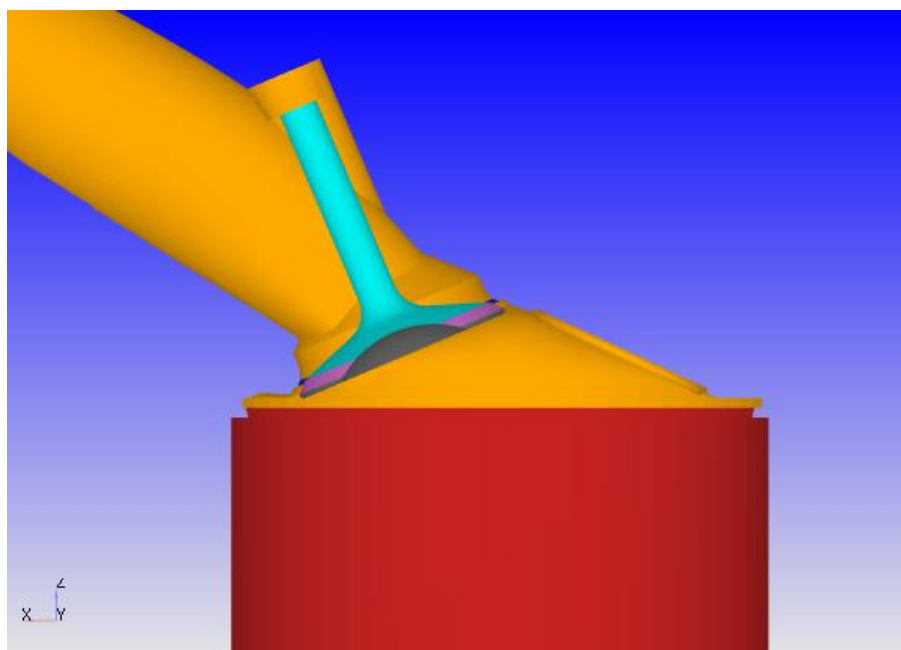


Figura 4.10 – Detalhe do deslocamento da válvula de admissão. Fonte: Autor

Para o coeficiente de descarga reverso da válvula de admissão, considerou-se a extremidade do cilindro como a entrada do domínio à pressão de 101325,0 Pa e a semiesfera como a saída do domínio à pressão de 91192,5 Pa. Também é considerado o ar escoando à temperatura de 300k e as paredes do domínio à mesma temperatura. A

válvula era deslocada a cada 1mm e calculado 10.000 em cada simulação. Totalizando mais 11 simulações numéricas.

Para o cálculo do coeficiente das válvulas de exaustão direto e reverso, foi adotado o mesmo procedimento descrito para as válvulas de admissão com uma leve alteração. A extremidade do cilindro é a entrada do domínio e a semiesfera a saída para o coeficiente direto das válvulas de exaustão, e o sentido inverso caracteriza o coeficiente reverso. Em outras palavras, o coeficiente direto segue o escoamento natural das válvulas operando no motor. Foram realizadas 9 simulações numéricas no cálculo direto até que a válvula de exaustão atingisse seu levantamento máximo de 8,83mm e mais 9 simulações para o seu cálculo reverso. Em todas essas simulações, permaneceu o critério de 10.000 ciclos para a sua estabilização.

O tamanho base da malha, em todas as 40 simulações descritas, foi de 4 mm (dx) x4 mm (dy) x4 mm (dz). Foi mantido um refinamento fixo no assento das válvulas de 4 níveis e dois refinamentos fixos cilíndricos com 2 escalas de refinamento, como mostra a Figura 4.11. Colocou-se em todo o domínio o refinamento de malha adaptativo, AMR (do inglês, *Adaptive Mesh Refinement*), de 3 níveis de velocidade com o subcritério de 1m/s de variação. Para a descrição da turbulência, foi utilizado o modelo RNG k- ϵ .

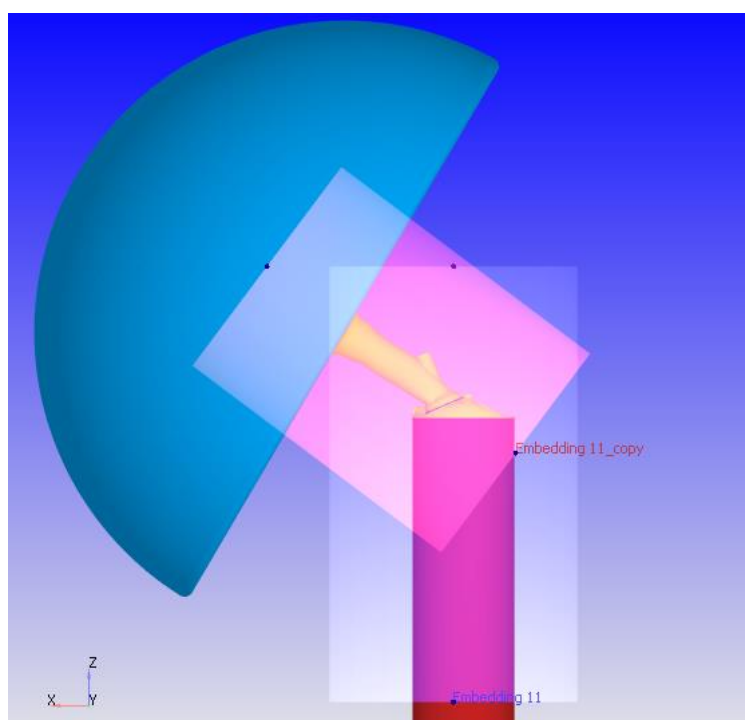


Figura 4.11 – Refinamentos fixos cilíndricos representados pelas regiões quadradas. Fonte: Autor

4.4.1 CÁLCULO DO COEFICIENTE DE DESCARGA DAS VÁLVULAS

Na Figura 4.12e na Figura 4.13 são mostradas as medidas da vazão mássica de ar em cada ciclo calculado para respectivamente as 11 simulações realizadas do coeficiente de descarga direto das válvulas de admissão e as 11 do coeficiente reverso.

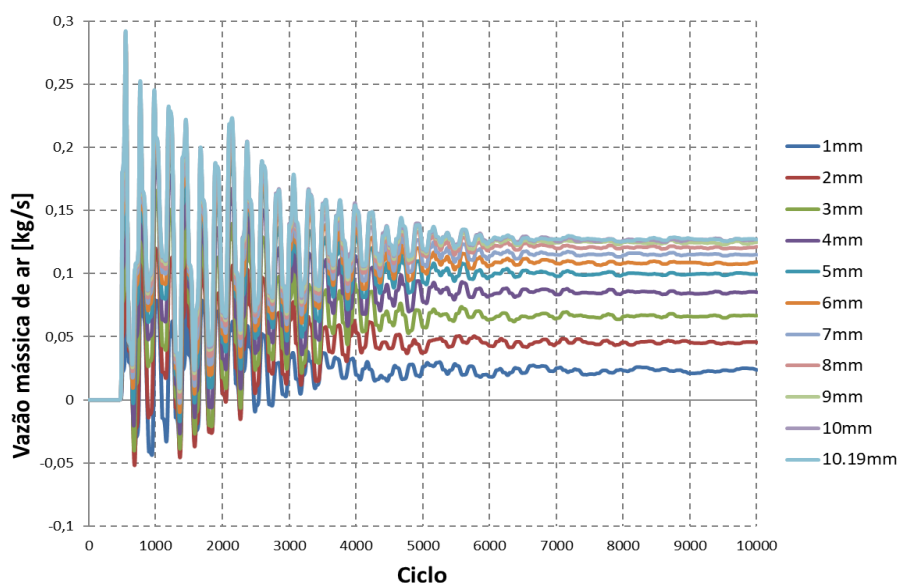


Figura 4.12 - Vazão mássica de ar para o escoamento direto da admissão. Fonte: Autor

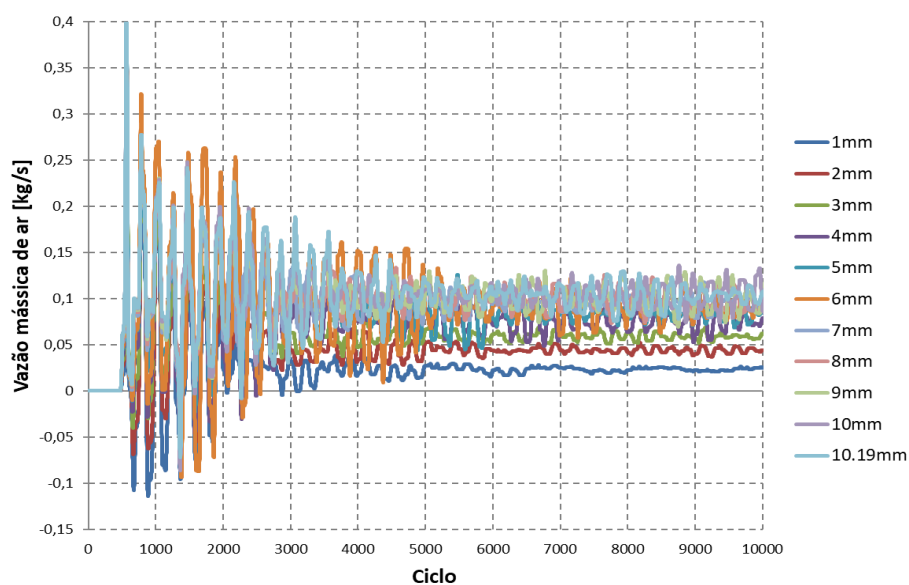


Figura 4.13 - Vazão mássica de ar para o escoamento reverso da admissão. Fonte: Autor

De maneira análoga, a Figura 4.14 e a Figura 4.15 mostram o resultado da vazão mássica de ar das 18 simulações para o cálculo do coeficiente de descarga das válvulas de exaustão direto e reverso.

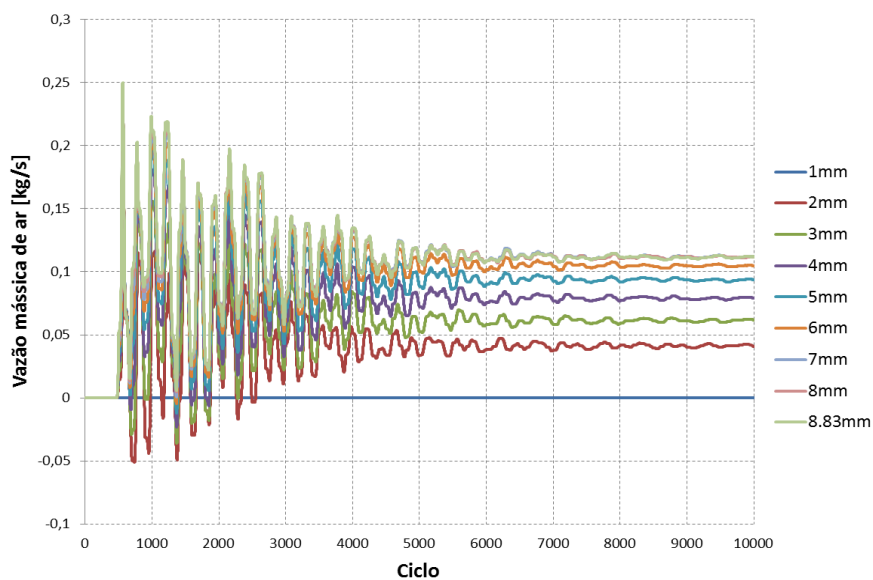


Figura 4.14 - Vazão mássica de ar para o escoamento direto da exaustão. Fonte: Autor

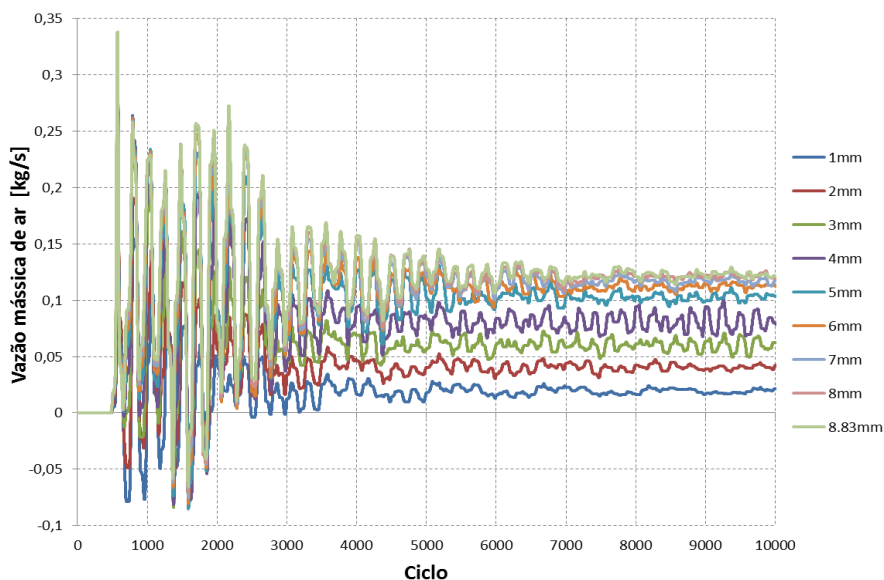


Figura 4.15 - Vazão mássica de ar para o escoamento reverso da exaustão. Fonte: Autor

Dessa forma, o valor da vazão mássica de ar é calculada como a média entre os últimos 1000 ciclos. A Tabela 4.3 e a Tabela 4.4 apresentam os valores de levantamento das válvulas com seus respectivos resultados de vazão mássica e coeficiente de descarga, este último calculado de acordo com a (3.2 e a (3.3, descritas na bibliografia, sendo que as áreas de referência utilizadas foram $9,03e^{-4} \text{ m}^2$ para a válvula de admissão e $6,16e^{-4} \text{ m}^2$ para a válvula de exaustão.

Tabela 4.3 – Cálculo do coeficiente da descarga da admissão. Fonte: Autor

Levante da válvula [mm]	Admissão Direto		Admissão Reverso	
	Média da vazão mássica [m ²]	Coefficiente de descarga	Média da vazão mássica [m ²]	Coefficiente de descarga
1,00	1,16E-02	0,0878	1,19E-02	0,0901
2,00	2,26E-02	0,1717	2,22E-02	0,1682
3,00	3,32E-02	0,2518	2,93E-02	0,2228
4,00	4,24E-02	0,3220	3,73E-02	0,2828
5,00	4,99E-02	0,3786	4,18E-02	0,3172
6,00	5,40E-02	0,4101	4,49E-02	0,3405
7,00	5,75E-02	0,4365	4,90E-02	0,3720
8,00	6,02E-02	0,4569	5,05E-02	0,3831
9,00	6,21E-02	0,4717	5,04E-02	0,3829
10,00	6,34E-02	0,4816	5,21E-02	0,3954
10,19	6,35E-02	0,4820	5,19E-02	0,3943

Tabela 4.4 – Cálculo do coeficiente de descarga da exaustão. Fonte: Autor

Levante da válvula [mm]	Exaustão Direto		Exaustão Reverso	
	Média da vazão mássica [m ²]	Coefficiente de descarga	Média da vazão mássica [m ²]	Coefficiente de descarga
1,00	1,28E-07	0,0	9,95E-03	0,1107
2,00	2,06E-02	0,2290	2,04E-02	0,2274
3,00	3,06E-02	0,3404	3,01E-02	0,3349
4,00	3,93E-02	0,4370	3,99E-02	0,4442
5,00	4,66E-02	0,5187	5,17E-02	0,5752
6,00	5,22E-02	0,5813	5,65E-02	0,6285
7,00	5,57E-02	0,6199	5,85E-02	0,6512
8,00	5,54E-02	0,6163	6,06E-02	0,6740
8,83	5,59E-02	0,6221	6,12E-02	0,6813

Como pode ser notado, o coeficiente de descarga direto das válvulas de exaustão foi nulo para o levantamento de 1mm, devido a vazão mássica quase inexistente de $1,28e^{-7} \text{ Kg/s}$. Entretanto, esse valor não é realista, sendo ele substituído pelo mesmo

valor calculado para o coeficiente de descarga reverso das válvulas de exaustão. Assim, esses valores foram utilizados no modelo unidimensional do GT-Power.

4.5 CONDIÇÕES DE OPERAÇÃO

Foram utilizadas cinco diferentes condições de operação, e estas se encontram sintetizadas na Tabela 4.5. Em todos os casos, o motor operou com a rotação de 3000 rpm a aproximadamente 6 bar de BMEP. Nos casos numerados de 2 a 5, o motor estava instrumentado para a razão volumétrica de compressão de 11,5:1, e neles, foram detectados falhas do sensor de pressão de exaustão. Por isso, visando uma melhor validação do mecanismo cinético, aquisitou-se novamente os dados do motor na condição de operação do caso 1 e com a razão volumétrica de compressão de 12,0:1.

Tabela 4.5 – Condições de operação do SCRE. Fonte: Autor

Condição de Operação	1	2	3	4	5
Combustível	E10	E22	E50	E85	E100
Rotação [rpm]	3000	3000	3000	3000	3000
NIMEP [bar]	6,66	6,83	6,85	6,88	6,83
BMEP [bar]	6,02	6,03	5,99	6,04	6,02
Razão volumétrica de compressão	12:1	11,5:1	11,5:1	11,5:1	11,5:1
Lambda	1,01	1,00	1,00	1,00	1,00
Massa de combustível por ciclo [mg]	21,5	23,6	26,4	31,1	34,5
Início da injeção [°]	-290	-270	-300	-300	-319
Duração da injeção [°]	29,6	33,9	37,2	43,1	49,1
Avanço de ignição [°]	-18,5	-19,5	-19,5	-20,5	-23,0
Vazão mássica de ar [Kg/h]	27,1	27,3	26,1	26,1	27,3
Temperatura na admissão [k]	298	302	300	300	302
Temperatura na exaustão [k]	705	973	963	948	936

Para todos os casos, foram feitas a média de 200 ciclos do motor e esses ensaios experimentais foram conduzidos pela equipe de experimentação do CTM-UFMG. Por não ser o escopo deste trabalho, mais detalhes sobre a aquisição dos dados experimentais encontram-se no Anexo A.

4.6 METODOLOGIA NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL

O modelo unidimensional foi desenvolvido na plataforma de softwares GT-Suíte v2016, contendo o pacote de objetos para a modelagem de motores GT-Power. O primeiro modelo criado foi o TPA (do inglês, *Three Pressure Analyse*). Entretanto, constatou-se uma pequena divergência na medida da pressão de exaustão e confirmou-se uma falha do sensor durante os ensaios experimentais nas condições de operação 2, 3, 4 e 5. Devido à importância dessa medida para a simulação tridimensional, pois ela é uma condição de contorno essencial para a simulação CFD 3D, um modelo completo foi criado no GT-Power. Nesse modelo, todo o sistema de admissão e exaustão, partindo do cilindro até a pressão ambiente, é simulado. Dessa forma, as pressões de admissão e exaustão serão saídas do modelo completo do GT-Power.

Assim, nas condições de operação 2, 3, 4 e 5, cuja razão volumétrica de compressão é 11,5:1, foram simulados no modelo completo e feita a correção para os dados da pressão instantânea da exaustão. Já para a condição de operação 1, como foram refeitos os ensaios experimentais após a detecção da falha do sensor, essa condição pode ser modelada por um TPA.

As simulações unidimensionais são relevantes para averiguar qualquer divergência dos dados experimentais, além da extrapolação de alguma medida que possa ser de difícil obtenção experimental, como também para a obtenção de alguns dados fornecidos experimentalmente com uma maior discretização angular. Essa maior discretização tem um impacto positivo quando importadas nas simulações tridimensionais. Todas essas simulações foram realizadas em computador com 4 processadores (modelo Intel i7), 16 Gb de memória RAM, HD de 1 Tb, sem placa de vídeo dedicada ou melhoria gráfica.

4.6.1 CRIAÇÃO DO MODELO NO GT-POWER

A criação de um modelo no programa GT-Power ocorre a partir da junção de objetos ou ‘blocos’ específicos que representam os sistemas constituintes do motor disponível na biblioteca do programa. Esses objetos são interligados seguindo a lógica de escoamento do fluido. Assim, o domínio computacional, Figura 4.5, foi importado para o programa SpaceClaim para o tratamento da geometria e eliminação das válvulas, pistão e cilindro. Essas partes eliminadas possuem objetos próprios na biblioteca do GT-Power. A Figura 4.16 ilustra a geometria final do SpaceClaim.

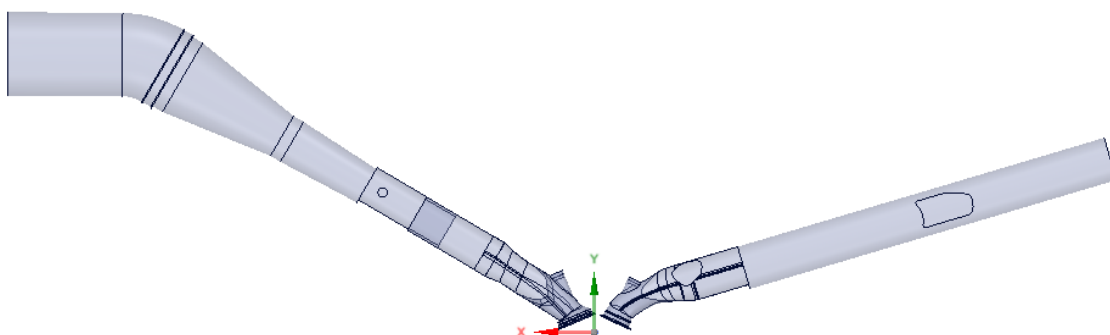


Figura 4.16 – Geometria após tratamento no SpaceClaim. Fonte: Autor

Após o tratamento no SpaceClaim, essa geometria é importada para o programa GEM3D. Nesse programa, a geometria é subdividida em pequenos dutos, e essas divisões, quando exportadas para o GT-Power, gerarão os objetos que representam os dutos de admissão e exaustão. A Figura 4.17 ilustra o processo final de divisões no GEM3D e a Figura 4.18, os respectivos objetos criados.

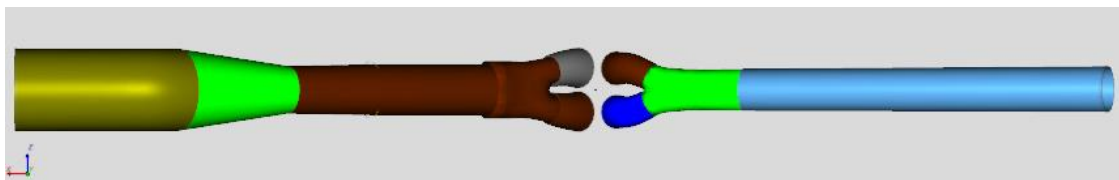


Figura 4.17 – Geometria subdividida no GEM3D. Fonte: Autor

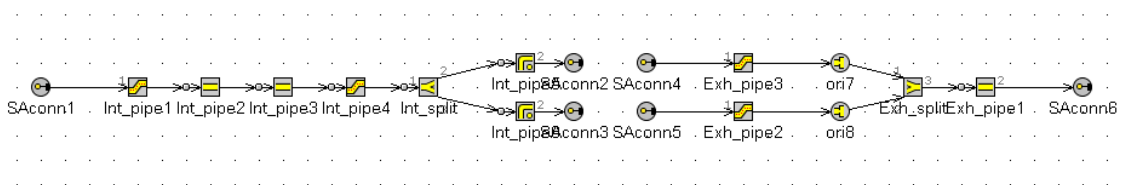


Figura 4.18 – Objetos criados no GT-Power relativo à subdivisão do GEM3D .

Fonte: Autor

Uma vez no GT-Power, são acrescentados os outros objetos específicos que complementam o modelo. Esses objetos representam, por exemplo, o cilindro, as válvulas, o eixo de virabrequim, o injetor e as condições de fronteiras do sistema.

As temperaturas dos objetos que representam o cilindro e os dutos de admissão e exaustão podem ser caracterizadas de duas maneiras: impostas pelo usuário e calculadas. Em todas as simulações realizadas, essas temperaturas foram calculadas pelo programa; para isso, modelou-se o sistema de arrefecimento, de lubrificação, especificou-se detalhes do material e alguns dados específicos do cabeçote, pistão, cilindro, válvulas e de cada duto modelado.

4.6.2 MODELO TPA - THREE PRESSURE ANALYS

Como o próprio nome descreve, o TPA utiliza como dados de entrada três pressões instantâneas: a pressão medida na admissão, a pressão medida na exaustão e a pressão medida no cilindro. Essa abordagem requer um modelo mais simplificado, incluindo as válvulas e a modelagem dos pórticos de admissão e exaustão no mínimo, ou seja, até o ponto onde está localizado o sensor que efetuou a medida instantânea (Gama Technologies, 2016).

Assim, como condição de contorno, são implementadas as pressões instantâneas experimentais da admissão e exaustão nas fronteiras do sistema. Já no objeto que representa o cilindro, é selecionado o módulo de cálculo TPA e adicionado também como condição inicial o valor da pressão no cilindro obtida experimentalmente. O modelo final é ilustrado na Figura 4.19.

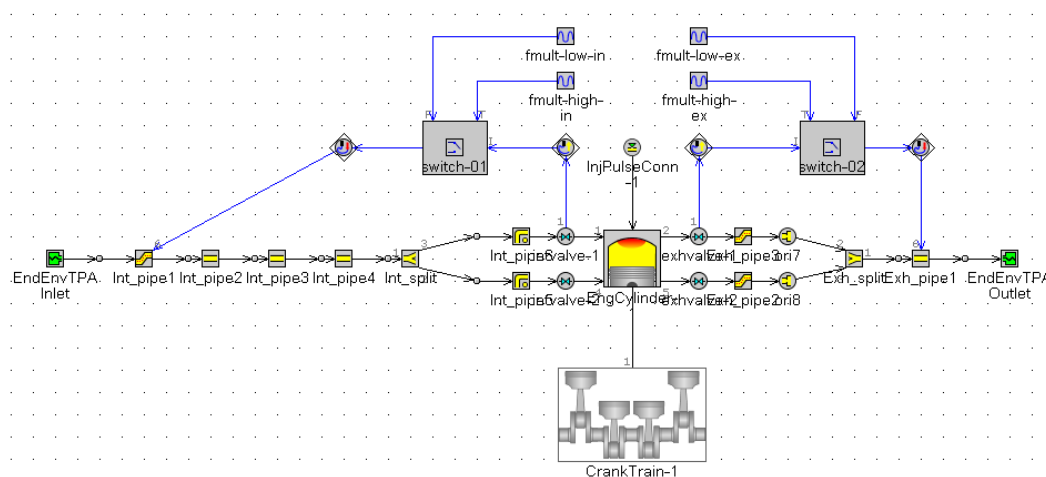


Figura 4.19 - Modelo TPA, onde os blocos em verde representam a localização dos sensores de aquisição das pressões de admissão e exaustão respectivamente. Fonte: Autor

Uma simulação TPA dura em média de 10 a 15 segundos no modelo criado. Nesse modelo são também reajustados alguns pequenos erros de referenciamentos ou defasagem de fase, que podem ter origens diversas, tais como ruídos e atrasos, e assim simulados novamente, sendo um processo iterativo até que todas as correções necessárias sejam realizadas.

4.6.3 CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO 1 – TPA

A condição de operação 1 (E10, 3000 rpm e 6 Bmep) foi a única possível de se modelar pelo TPA. Durante a simulação, pelo gráfico do logaritmo da pressão no cilindro em função do volume, verificou-se uma diferença no tempo de abertura da válvula de exaustão, como pode ser visto na Figura 4.20. Ela abria 4° antes em relação ao medido experimentalmente. Essas pequenas diferenças são usuais, pois estão relacionadas às incertezas de todo ensaio experimental.

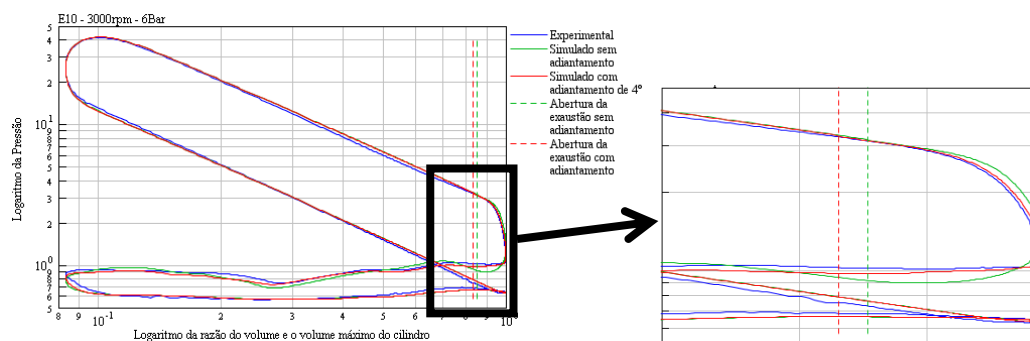


Figura 4.20 – Detalhe da verificação do adiantamento da abertura da válvula de exaustão. Fonte: Autor

Esse adiantamento permaneceu constante em todos os casos simulados unidimensionalmente pelo modelo TPA e pelo modelo completo (apresentado na próxima subseção). Dessa forma, a Figura 4.21 mostra o diagrama de válvulas em função do ângulo de virabrequim corrigido que será utilizado nas simulações tridimensionais, assim como o original medido experimentalmente.

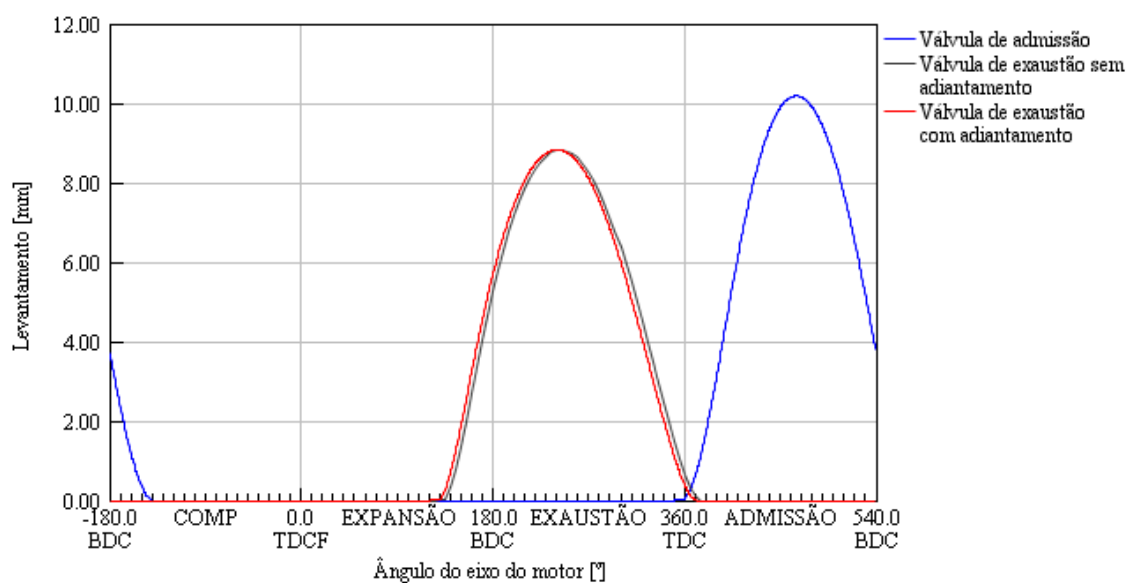


Figura 4.21 – Diagrama de válvulas, em destaque as diferenças no tempo da válvula de exaustão. Fonte: Autor

A Figura 4.22 representa a curva de pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do motor, para o caso 1. Todos os pontos apresentaram diferenças percentuais inferiores a 3%, sendo que a diferença para a pressão máxima no cilindro foi 1,04%

(simulado: 41,86 bar; experimental: 41,43 bar) e -0,93% para o ângulo de pressão máxima (simulado: 13,87°; experimental: 14,0°). Já a Figura 4.23 mostra o logaritmo da pressão no cilindro em função do logaritmo da razão do volume do cilindro e o volume máximo do cilindro mostrando a boa concordância entre os dados numéricos e experimentais, até no período de bombeamento.

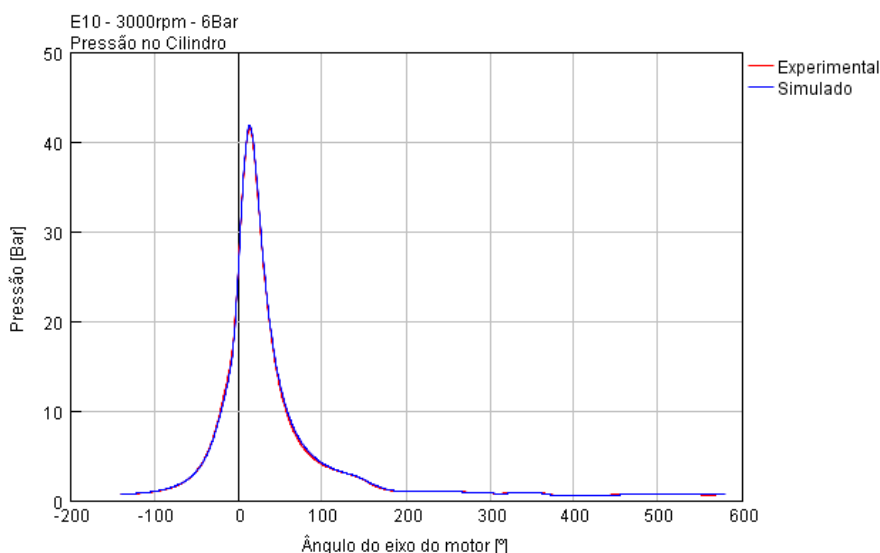


Figura 4.22 - Pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do motor para a condição de operação 1 (E10, 3000 rpm e 6 Bmep) . Fonte: Autor

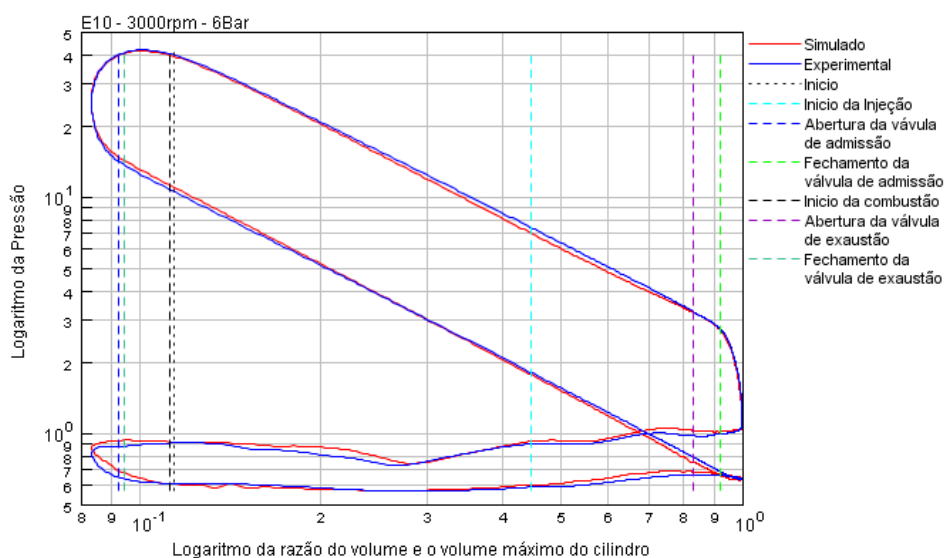


Figura 4.23 - Logaritmo da pressão no cilindro em função do logaritmo da razão do volume do cilindro e o volume máximo do cilindro para a condição de operação 1 (E10, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

O modelo unidimensional possibilita o cálculo de outros dados importantes que não foram medidos experimentalmente, como a massa aprisionada no cilindro, a taxa de liberação de calor e a energia liberada acumulada, como mostra a Figura 4.24, a Figura 4.25 e a Figura 4.26.

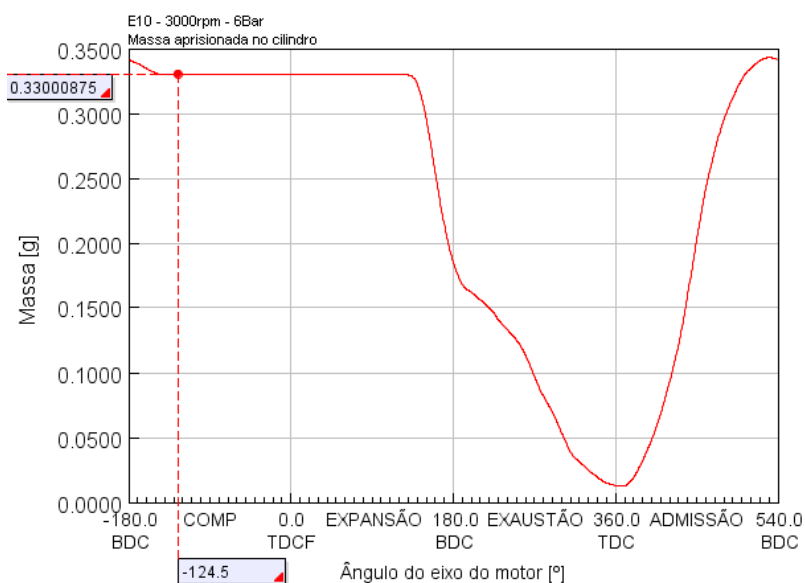


Figura 4.24 - Massa aprisionada no cilindro em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 1 (E10, 3000 rpm e 6 Bmep) .

Fonte: Autor

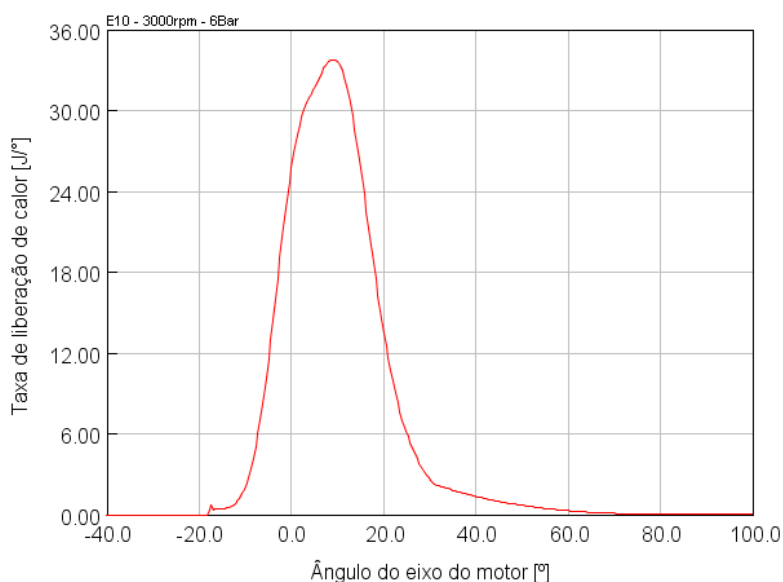


Figura 4.25 – Taxa de liberação de calor em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 1 (E10, 3000 rpm e 6 Bmep).

Fonte: Autor

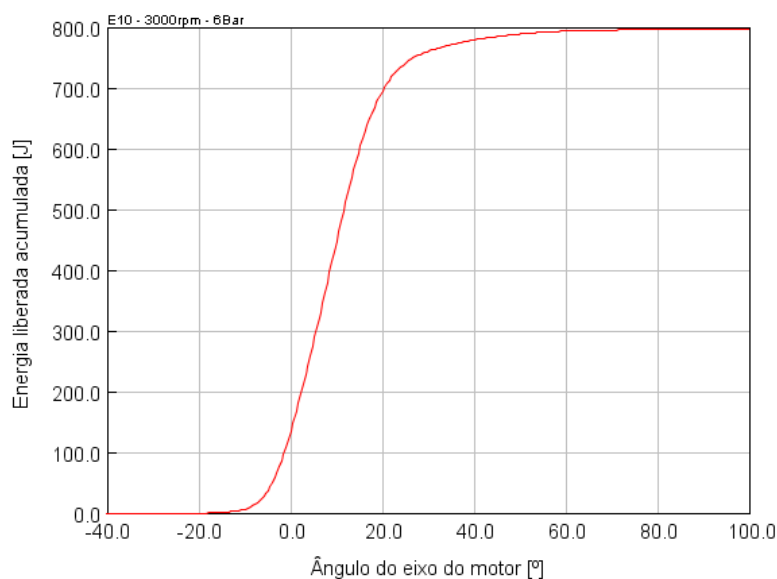


Figura 4.26 - Energia liberada acumulada em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 1 (E10, 3000 rpm e 6 Bmep).

Fonte: Autor

4.6.4 MODELO COMPLETO: COMBUSTÃO POR WIEBE

Diferente do TPA, onde o modelo se restringe até os pontos de instrumentação dos sensores rápidos de admissão e exaustão, o modelo completo simulou desde o ponto da admissão a pressão ambiente até o final da exaustão a pressão ambiente. Assim, os dutos de admissão e exaustão da sala de ensaio tiveram que ser medidos e modelados de acordo com as suas características, complementando, assim, o modelo inicial do TPA e elevando sua complexidade. A Figura 4.27 mostra o modelo completo final.

Após inserir todos os dados experimentais necessários, esse modelo foi calibrado em duas etapas. A primeira sem combustão, ajustando somente a vazão mássica com um erro inferior a 3%. Em seguida, era implementado o objeto de combustão, na qual era calculada a taxa de queima pelos expoentes de Wiebe e ajustada a transferência de calor no cilindro. Cada simulação durava em média 7 minutos .

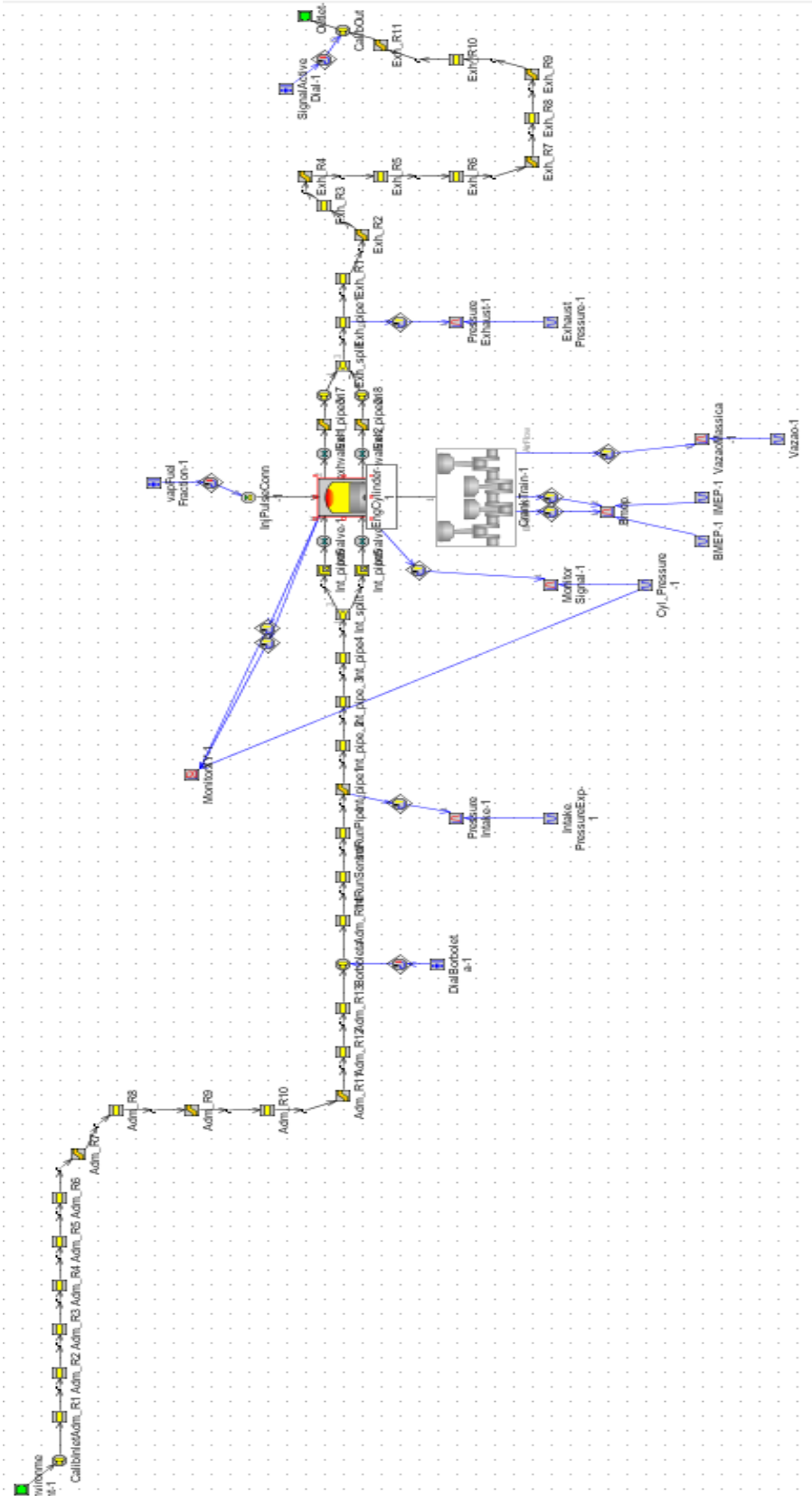


Figura 4.27 - Modelo Completo, onde os blocos em verde representam o início da admissão e o final da exaustão, ambos à temperatura e pressões ambiente. Fonte:

Autor

Ao final, as medidas das pressões de admissão e exaustão em função do ângulo do eixo de virabrequim eram resultados desse modelo. Dessa forma, foram comparadas as medidas da pressão da admissão e do cilindro do GT-Power com os dados experimentais. Os resultados do GT-Power e os experimentais apresentaram uma boa concordância, sustentando o uso da pressão de exaustão numérica em substituição à medida errada experimental. Assim, foram reproduzidas as condições de operação 2, 3, 4 e 5 no modelo completo.

4.6.5 CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO 2, 3, 4 E 5 – MODELO COMPLETO

A condição de operação 2 (E22, 3000 rpm e 6 Bmep) foi a primeira a ser calibrada no GT-Power. A Figura 4.28 mostra a curva de pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do motor, onde a curva vermelha representa os dados simulados e a azul, os dados experimentais. A diferença percentual entre o ensaio experimental e o numérico foi menos que 5% em todos os pontos. Já a Figura 4.29 mostra o logaritmo da pressão no cilindro em função do logaritmo da razão do volume do cilindro e o volume máximo do cilindro. Ela amplifica as diferenças entre as duas curvas e mesmo no período de bombeamento temos uma concordância aceitável entre os dados experimentais e numéricos.

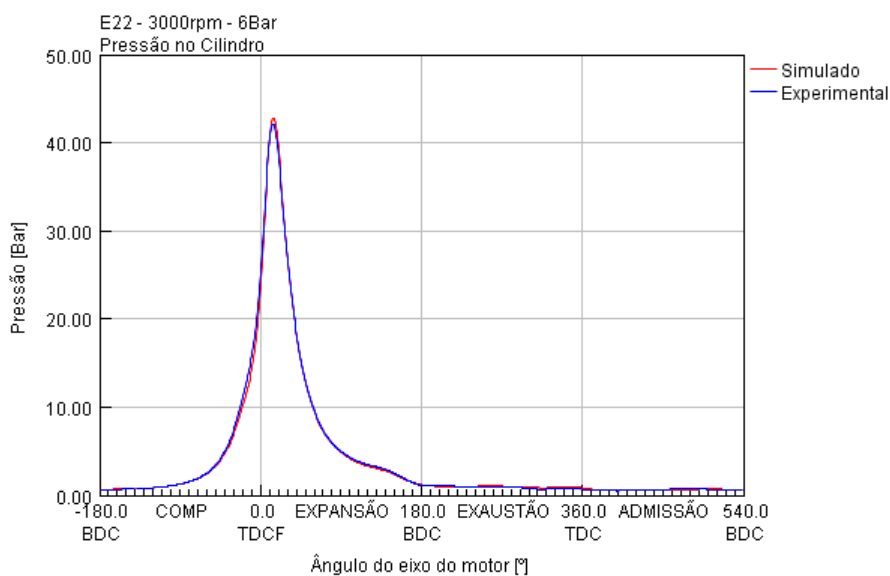


Figura 4.28 - Pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do motor para a condição de operação 2 (E22, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

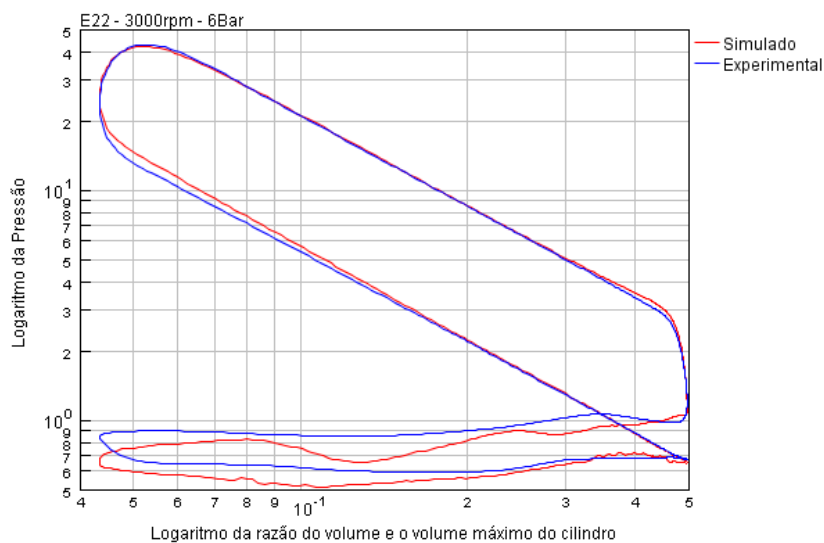


Figura 4.29 - Logaritmo da pressão no cilindro em função do logaritmo da razão do volume do cilindro e o volume máximo do cilindro para a condição de operação 2 (E22, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

A Figura 4.30 mostra a pressão da admissão em função do ângulo do eixo do motor. Observa-se que os resultados obtidos utilizando-se o modelo completo apresentou a mesma tendência dos dados experimentais. Com isso, pode-se inferir que o resultado desse modelo para a pressão da exaustão está coerente, como mostra a Figura 4.31. A curva em vermelho na Figura 4.31 evidencia como deveria ter sido a medida do sensor de exaustão caso não tivesse ocorrido a falha do mesmo.

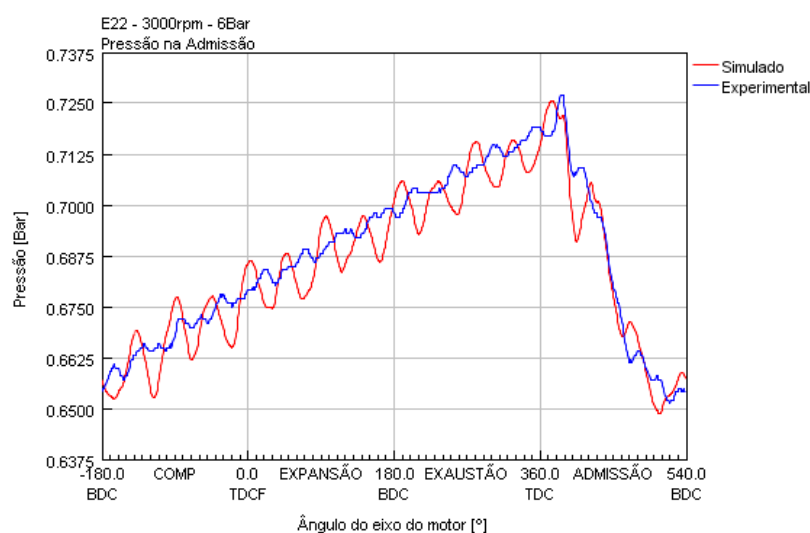


Figura 4.30 - Pressão da admissão em função do ângulo do eixo do motor para a condição de operação 2 (E22, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

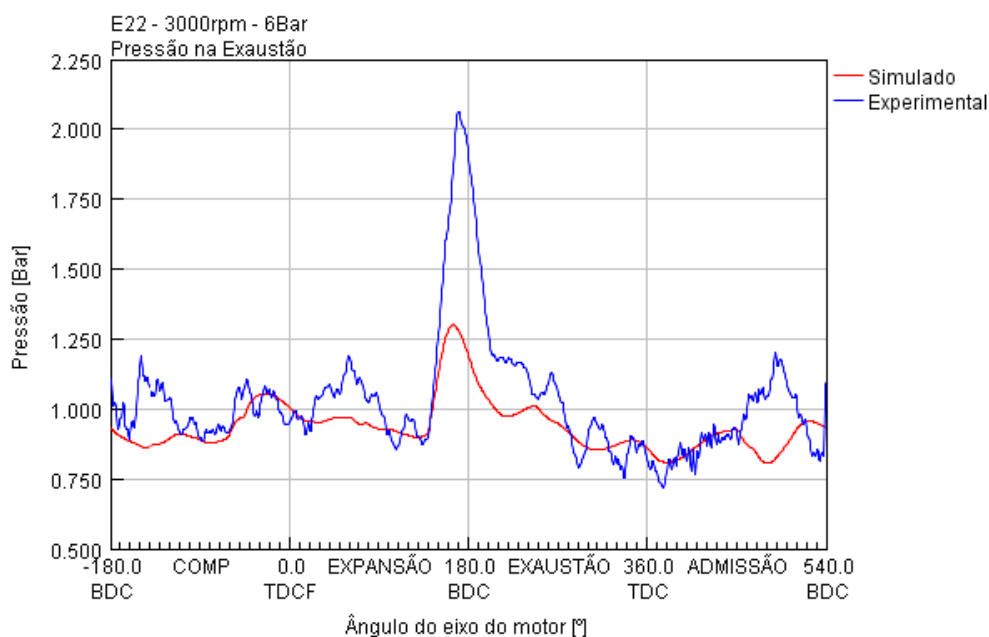


Figura 4.31 - Pressão da exaustão em função do ângulo do eixo do motor para a condição de operação 2 (E22, 3000rpm e 6Bmep). Fonte: Autor

De maneira análoga ao TPA, juntamente com a pressão da exaustão, outros dados complementares foram calculados, como a massa aprisionada no cilindro, a taxa de liberação de calor e a energia liberada acumulada, como mostra Figura 4.32, Figura 4.33 e Figura 4.34.

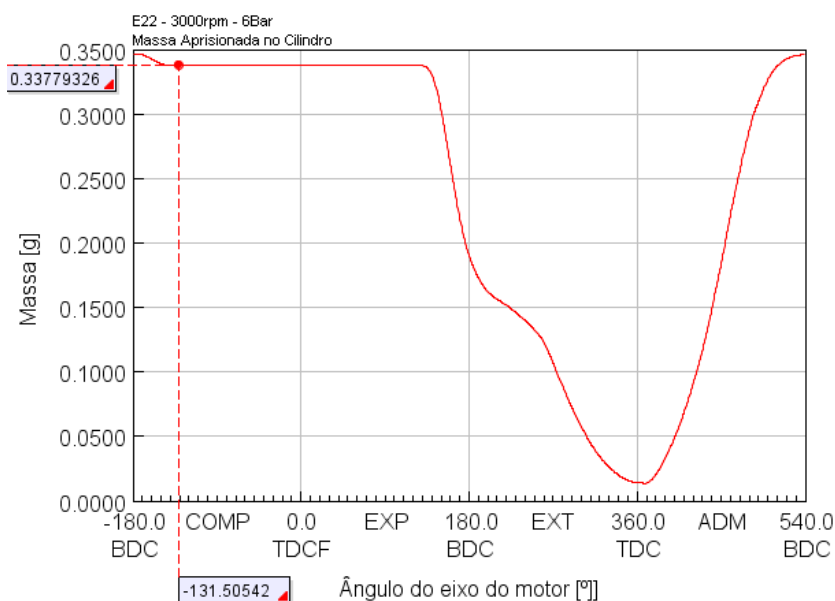


Figura 4.32 - Massa aprisionada no cilindro em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 2 (E22, 3000 rpm e 6 Bmep).

Fonte: Autor

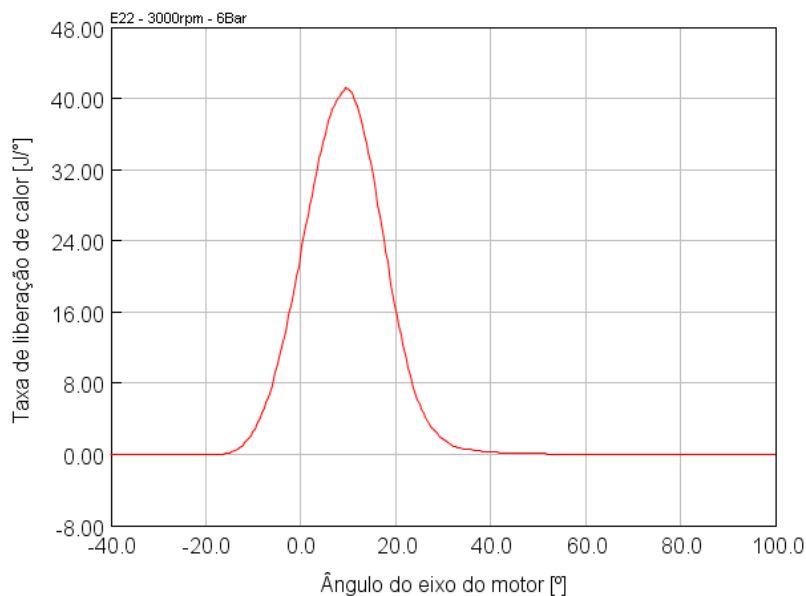


Figura 4.33 - Taxa de liberação de calor em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 2 (E22, 3000 rpm e 6 Bmep).

Fonte: Autor

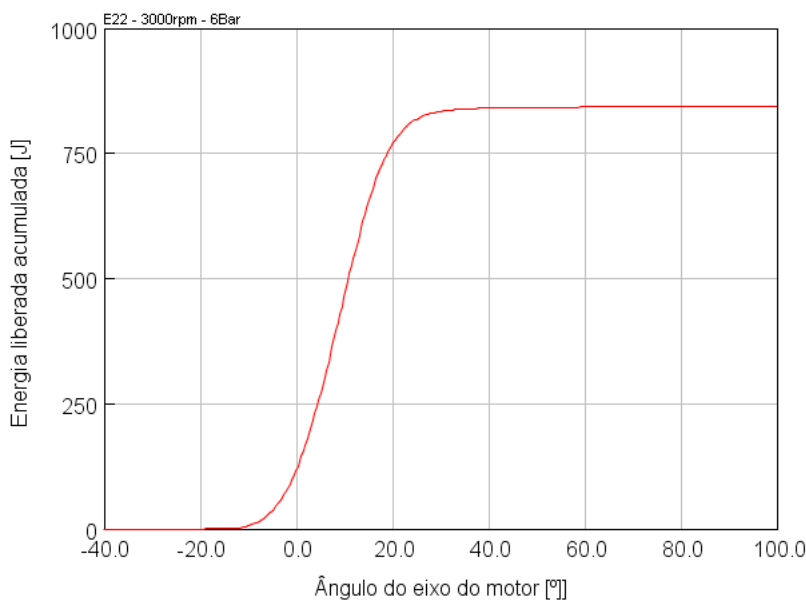


Figura 4.34 - Energia liberada acumulada em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 2 (E22, 3000 rpm e 6 Bmep).

Fonte: Autor

A Tabela 4.6 mostra os resultados comparativos da simulação na condição de operação 2, como também para as condições 3, 4 e 5. Devido ao volume de dados gerados, os gráficos relativos às condições 3, 4 e 5 encontram-se no **Anexo B**. Como

pode ser visto, a maioria dos resultados apresentam uma diferença em relação aos dados experimentais inferior a 3%, sendo que em todos os outros pontos de operação modelados unidimensionalmente apresentaram um desvio máximo em relação ao experimental inferior a 5%.

Tabela 4.6 – Resultados comparativos das condições de operação simuladas. Fonte: Autor

Condição de Operação	2	3	4	5
IMEP simulado [bar]	6,89	6,89	7,00	6,90
IMEP experimental [bar]	6,83	6,85	6,88	6,83
Diferença relativa do IMEP	0,88%	0,58%	1,74%	1,02%
BMEP simulada [bar]	6,09	6,02	6,16	6,09
BMEP experimental [bar]	6,03	5,99	6,04	6,02
Diferença relativa do BMEP	0,99%	0,50%	1,98%	1,16%
Vazão mássica simulada [kg/h]	26,97	25,99	26,08	26,69
Vazão mássica experimental [kg/h]	27,30	26,10	26,10	27,3
Diferença relativa da Vazão mássica	-1,21%	-0,42%	-0,07%	-2,23%
Pressão máxima no cilindro simulado [bar]	42,79	41,09	41,55	41,73
Pressão máxima no cilindro experimental [bar]	42,12	40,18	41,21	41,50
Diferença relativa a Pressão máxima no cilindro	1,59%	2,26%	0,82%	0,55%
Ângulo de pressão máxima simulado [°]	14,69	14,85	14,33	13,93
Ângulo de pressão máxima experimental [°]	14,33	14,67	14,37	13,35
Diferença relativa ao Ângulo de pressão máxima	2,55%	1,29%	-0,27%	4,38%

4.7 METODOLOGIA NUMÉRICA TRIDIMENSIONAL

A modelagem numérica tridimensional foi desenvolvida no programa CONVERGE CFD. A capacidade computacional disponível para essas simulações foi de 3 Servidores Dell PowerEdge R730 com as seguintes características cada: 2 processadores Intel Xeon E5-2699 v3 de 2,3GHz cache de 45M, QPI de 9,6 GT/s turbo, HT, 18núcleos/36 segmentos, 8 módulos de memória de 16GB RDIMM, 2133MT/s, Dual Rank e 2 discos 300GB 10K RPM SAS, 12Gbps

4.7.1 INJEÇÃO DE COMBUSTÍVEL

A injeção direta de combustível foi realizada com o injetor modelo Bosch HDEV 5.1. Caracterizado por sete furos de 0,17 mm de diâmetro cada e ângulo de cone externo de 20°. A medida do posicionamento de cada um dos furos, direção de cada jato, juntamente com o ângulo de cone foram obtidas pelo CTM-UFMG e detalhada no trabalho de Reis (REIS, ET AL., 2016). Esses dados são apresentados na Tabela 4.7.

Tabela 4.7 – Posicionamento e direção dos furos do injetor BOSCH HDEV 5.1.

Fonte: retirado de (Reis, et al., 2016)

Número do Orifício	Posição do Injetor			Direção do Jato		
	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	3,20E-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

No modelamento do processo de atomização do combustível, utilizou-se o modelo de Blob para a quebra primária do spray e para a quebra secundária, ajustou-se separadamente as constantes do modelo combinado de KH-RT. Para isso, foi simulado em um domínio cilíndrico a injeção do combustível à 100 bar de pressão da injeção e as condições ambientais 1 bar e 300 k. Mantendo todas as outras condições constantes, foram testados quatro valores, 1,73; 7,0; 60 e 100 da constante B_1 do modelo KH e também quatro valores, 0,1; 0,3; 0,5 e 1,0 da constante C_3 do modelo RT. Esses resultados foram comparados com ensaios experimentais. Todo o detalhamento desse estudo se encontra em um artigo publicado (BRAGA, ET AL., 2017). Os melhores resultados para o Bosch HDEV 5.1 foram o B_1 igual a 7,0 e o C_3 igual a 0,5. A Figura 4.35 mostra a evolução do spray de combustível com o uso desses valores selecionados para as constantes na configuração da simulação 3D em comparação ao ensaio experimental.

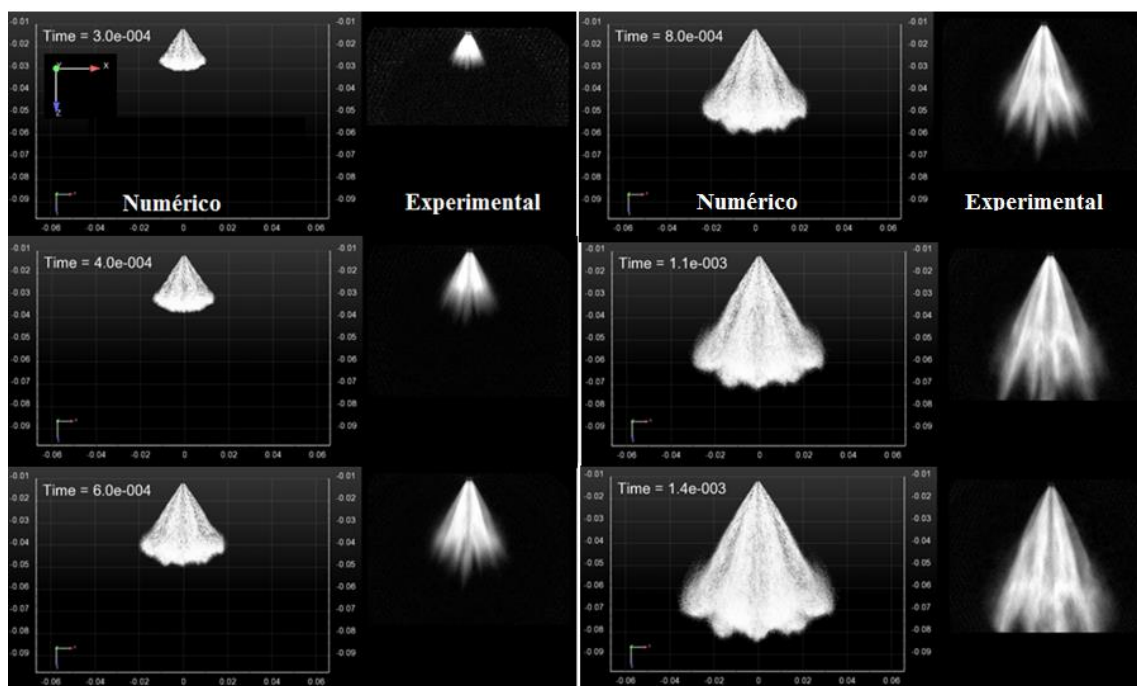


Figura 4.35 – Resultados numéricos e experimentais (por shadowgrafia) do desenvolvimento do spray após o ajuste das constantes do modelo KH-RT. Fonte: retirado de (Braga, et al., 2017)

O modelo KH-RT atuou desde o início da injeção do combustível. Para modelar a evaporação, usou-se a correlação de Frossling. Essa correlação calcula a taxa de evaporação do raio da gota no tempo baseado na difusividade mássica do vapor do combustível. A biblioteca do Converge CFD possui valores para os coeficientes de difusividade mássica para alguns combustíveis, como o etanol (D_o : 1,05E-05; n_o : 1,77).

Entretanto, após algumas simulações, verificou-se que o uso do valor padronizado para a gasolina (D_o : 7,9E-06; n_o : 1,87) não era representativo para as diferentes composições utilizadas. Assim, realizou-se um estudo para entender o comportamento desses coeficientes, onde verificou-se que as precisões desses valores são importantes para a formação da mistura ar-combustível em baixas rotações. Em altas rotações, o transporte turbulento governa a formação da mistura, tornando representativo o valor encontrado para coeficientes de difusividade na biblioteca do Converge CFD. Com base nisso, os coeficientes de difusividade mássica foram calculados pela média ponderada de cada espécie presente no combustível em relação à sua fração mássica, tal como descrita na Tabela 4.1. A Tabela 4.8 mostra esses valores calculados.

Tabela 4.8 – Coeficientes de difusividade mássica. Fonte: Autor

	E10	E22	E50	E85
D_o	6,766E-06	7,359E-06	8,46E-06	9,853E-06
n_o	1,74	1,74	1,75	1,76

O modelo de O'Rourke, baseado no número de Weber, foi utilizado para modelar a interação de filme líquido com as paredes dos cilindros e válvulas. Já o modelo NTC foi utilizado para modelar o fenômeno de colisão e coalescência das gotas e o arrasto das gotas pelo modelo de TAB.

4.7.2 GERAÇÃO DE MALHA

A geração de malha ocorreu em duas etapas, primeiro a geração de uma malha superficial e, em seguida, de uma malha de volumes finitos. Assim, ainda no SolidWorks, depois da definição do domínio computacional, criou-se uma malha superficial de volumes triangulares. Essa malha superficial é importada para o Converge CFD e serve de referência para a malha volumétrica. A Figura 4.36 e Figura 4.37 ilustram essa malha superficial.

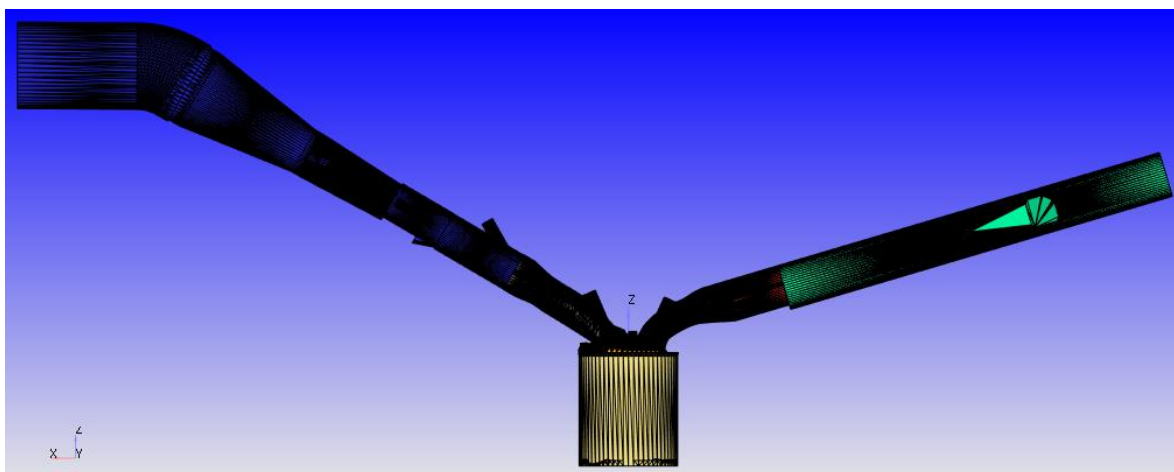


Figura 4.36 - Domínio computacional e malha superficial da simulação tridimensional. Fonte: Autor

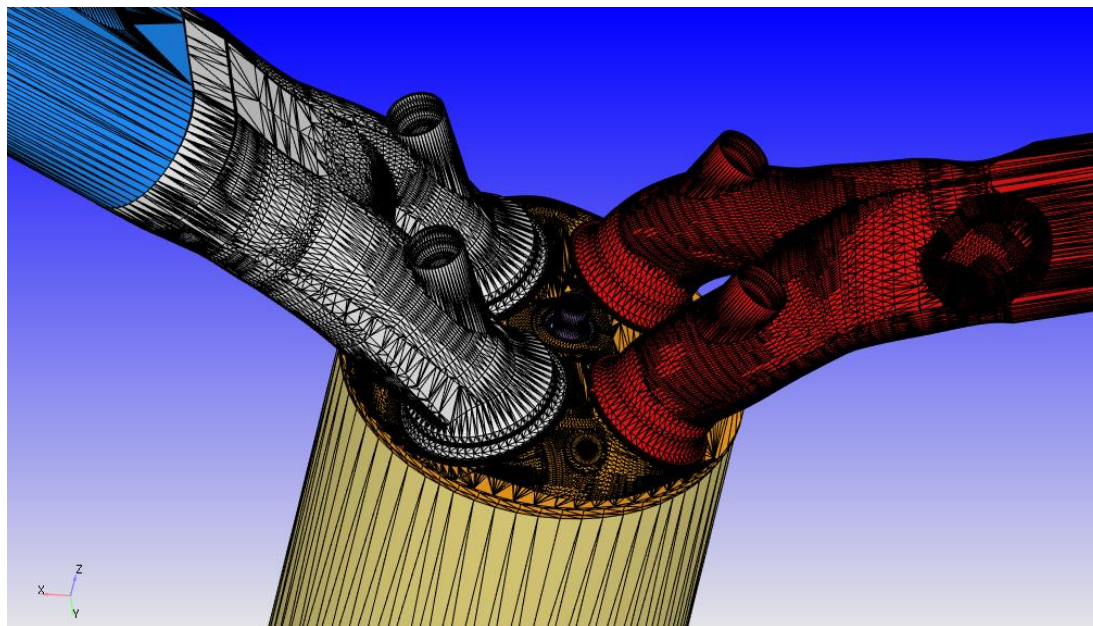


Figura 4.37 – Detalhe da malha superficial. Fonte: Autor

Tradicionalmente, os programas de CFD criam malhas volumétricas ajustadas, transformando os vértices e células no interior do domínio de forma a se adequar a geometria. Uma tarefa mais complexa para o ajuste de malha é quando o domínio apresenta uma geometria móvel, demandando um tempo extra do usuário, sendo que a modelagem de motores de combustão interna ilustra essa situação.

O Converge CFD, diferentemente dos programas tradicionais de CFD, não possui uma malha volumétrica fixa. A partir de uma malha superficial, ele gera a malha volumétrica a cada intervalo de tempo devido à duas ferramentas: Refinamento fixo e refinamento de malha adaptativo, AMR (do inglês, *Adaptive Mesh Refinement*). Em outras palavras, ele cria uma malha nova a cada passo de tempo. Dessa forma, o Converge CFD é capaz de reduzir o tempo computacional de uma simulação ao utilizar uma malha mais grosseira em regiões não críticas e posteriormente refina essa mesma região nos momentos necessários para capturar melhor os fenômenos ocorrentes.

Dessa forma, o tamanho base da malha foi de 4 mm (dx) x 4 mm (dy) x 4 mm (dz). Em relação a esse tamanho base, é definida a escala do refinamento fixo, como também a sua área e o período de atuação. A escala de refinamento, quantificada a partir do tamanho base de malha, é definida pela Equação 4.1.

$$\text{Escala da malha} = \frac{dx_{base}}{2^n} \quad (4.1)$$

Onde dx_{base} é o comprimento do volume no eixo x e n é a escala de refinamento. O refinamento fixo foi implementado na região do cilindro e da injeção de combustível, como mostra a Figura 4.38, na região da centelha elétrica, como mostra a Figura 4.39, e nas fronteiras das válvulas de admissão e exaustão. A Tabela 4.9 descreve os parâmetros de cada um desses refinamentos.

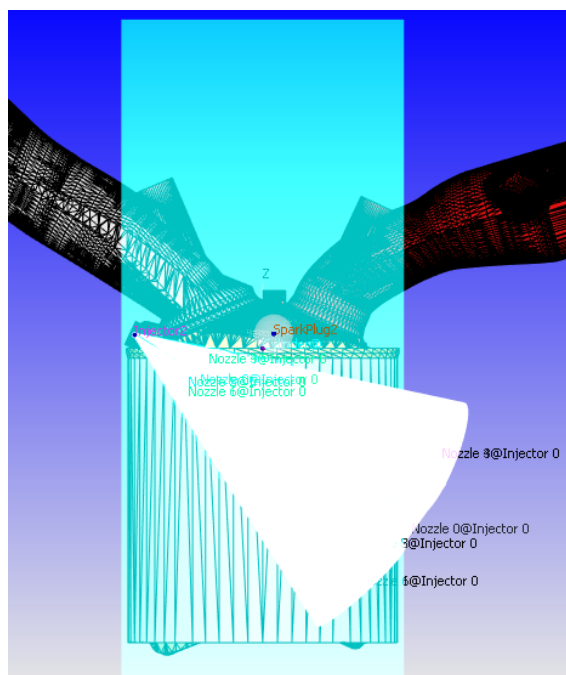


Figura 4.38 – Regiões quadrada e cônica representam respectivamente os refinamentos fixos do cilindro e da injeção de combustível. Fonte: Autor

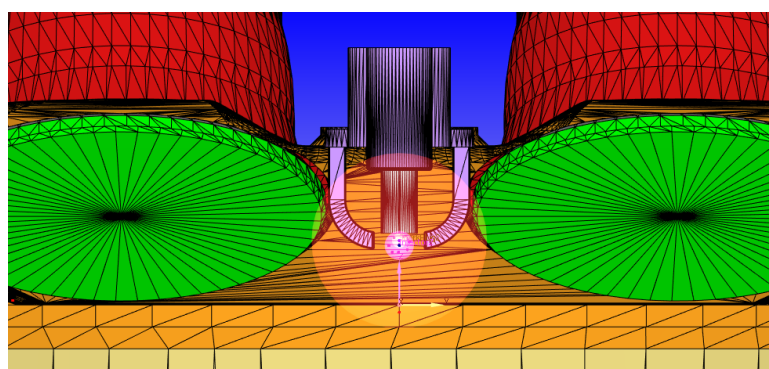


Figura 4.39 – Destaque para a região circular próxima da centelha elétrica que delimita o refinamento fixo. Fonte: Autor

Tabela 4.9 – Refinamento fixo para criação da malha volumétrica. Fonte: Autor

Região	Forma	Período	Escala	Tamanho da malha [mm]
Cilindro	Caixa	Permanente	2	1,00
Vela de ignição	Esférico	Cíclico	4	0,25
	Esférico	Cíclico	5	0,125
Injetor de combustível	Esférico	Cíclico	3	0,50
	Injetor	Cíclico	2	1,00
Válvula de Admissão	Fronteira	Permanente	3	0,50
Válvula de Exaustão	Fronteira	Permanente	3	0,50

Devido às características da criação da malha no Converge CFD, não é possível avaliar a malha com os critérios de malha dos testes tradicionais, tais como a geração da malha com um tamanho uniforme, e a partir de um fator de refinamento obter malhas com o comprimento característico menor que a de referência. Assim, foi realizado somente um teste de sensibilidade de malha para definir os parâmetros de refinamento do AMR.

4.7.3 TESTE DE SENSIBILIDADE DA MALHA PARA O AMR

Mantendo o tamanho de malha base e o refinamento fixo constante com os valores definidos anteriormente, realizou-se um teste de sensibilidade da malha. Utilizou-se as condições de operação 1 e um mecanismo cinético químico da literatura, variando somente a escala do AMR, de 2 a 5 em quatro simulações numéricas. Foram utilizados dois AMR, um no duto de admissão e outro no cilindro.

O AMR refina a malha baseado em condições de variação de temperatura e velocidade. Assim, para a admissão, foi utilizada uma variação de velocidade de 1m/s como critério de refinamento, e, no cilindro, uma variação de velocidade de 1m/s e uma de temperatura de 2,5k. Dessa forma, quando é detectada uma variação igual ou superior a esse valor, a malha é refinada nessa região respeitando a escala de AMR determinada.

Da Figura 4.40 à Figura 4.43 é mostrado o resultado da malha gerada nas simulações numéricas em um plano que passa no eixo de simetria da vela de ignição, normal ao plano (1, 0, 0). Todas as imagens foram tiradas no instante de -10° de ângulo do eixo do motor a fim de destacar o refinamento gerado no início da propagação da

frente de chama, destacando de maneira nítida o gradiente de temperatura. Em cada figura são destacadas duas regiões, a circulada em cinza representa o refinamento fixo constante em todas as simulações e a região circulada em preto, representa a atuação da escala de AMR definido. Nessas regiões pode-se perceber que a malha do AMR 2 não descreve bem o “contorno” da frente de chama, o que a partir do AMR 3 é bem definido pela malha gerada.

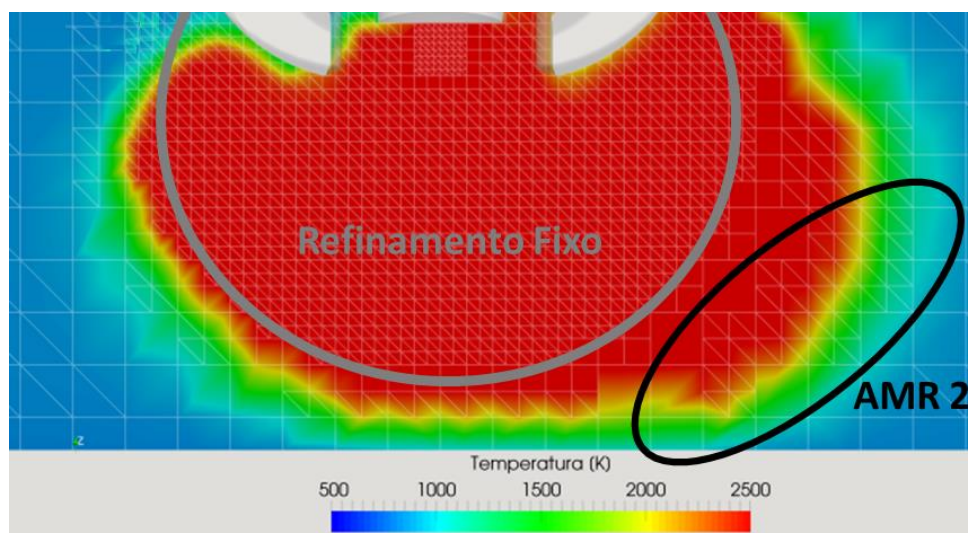


Figura 4.40 – Refinamento da malha na região da frente de chama gerado pelo AMR de 2 níveis. Fonte: Autor

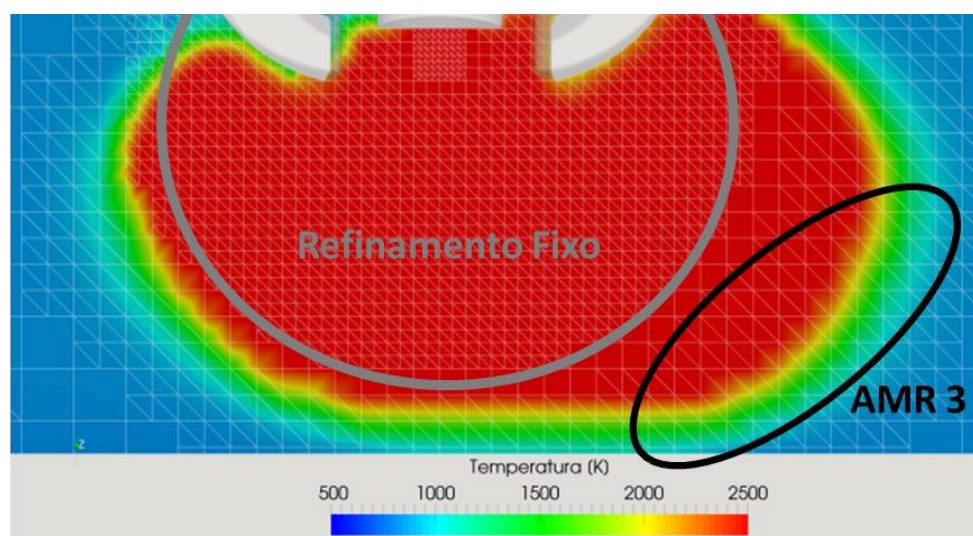


Figura 4.41 - Refinamento da malha na região da frente de chama gerado pelo AMR de 3 níveis. Fonte: Autor

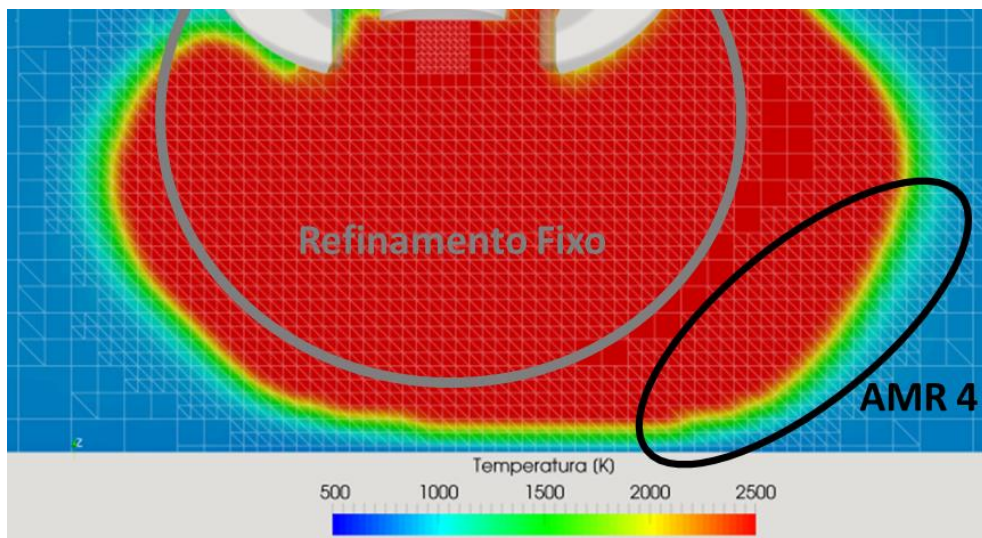


Figura 4.42 - Refinamento da malha na região da frente de chama gerado pelo AMR de 4 níveis. Fonte: Autor

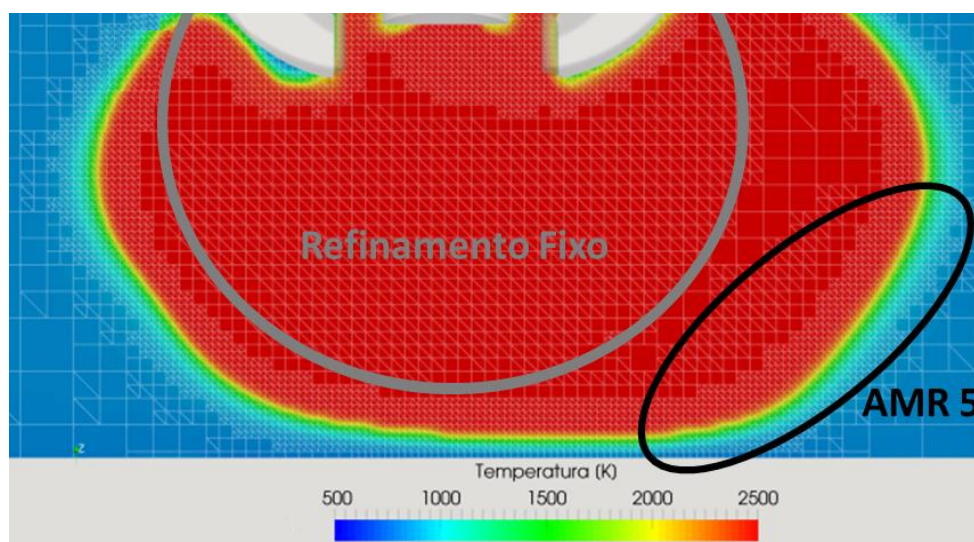


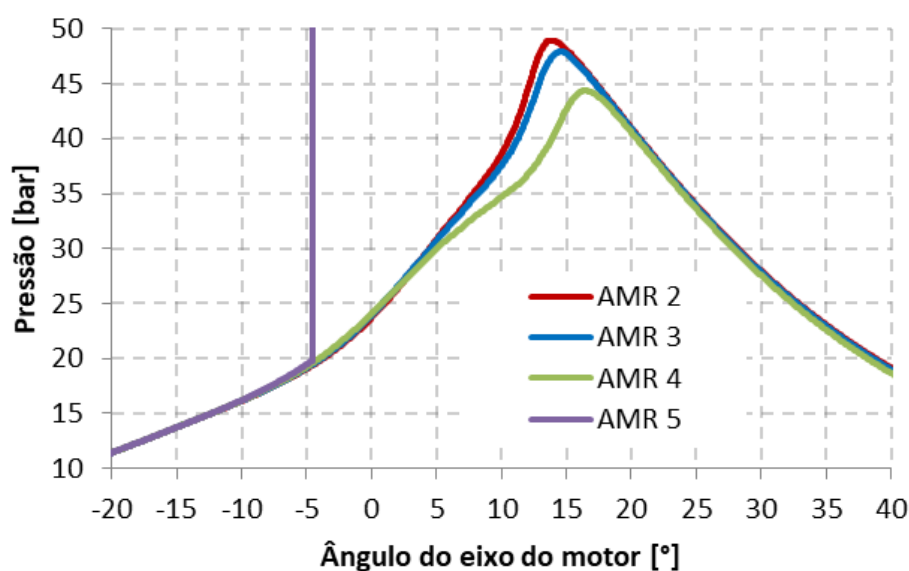
Figura 4.43 - Refinamento da malha na região da frente de chama gerado pelo AMR de 5 níveis. Fonte: Autor

Na Tabela 4.10 é apresentado o tamanho do volume calculado pela (4.1), o número de volumes presentes no domínio no instante de -10° de ângulo do eixo do motor e o número máximo de volumes durante a simulação, sendo este o momento da abertura das válvulas de exaustão a 136° . Como poder ser notado, o AMR 5 não possui número máximo de volumes, isso porque essa simulação divergiu no ângulo de -5° , sendo então essa malha desconsiderada.

Tabela 4.10 – Valores da simulação referentes a cada AMR avaliado. Fonte: Autor

Escala de refinamento	Tamanho da malha [mm]	Número de volumes a -10°	Número máximo de células durante a simulação
2	1,000	138.625	501.000
3	0,500	280.945	1.301.000
4	0,250	342.043	5.000.000
5	0,125	640.871	-

Para quantificar as diferenças entre as malhas, avaliou-se a pressão no cilindro e a taxa de liberação de calor em função do ângulo de eixo do motor para os refinamentos correspondentes a cada AMR, como mostra respectivamente a Figura 4.44 e a Figura 4.45. Nessas imagens é possível perceber que as curvas que representam AMR 2 e o AMR 3 possuem comportamentos similares. Os valores para a pressão máxima no cilindro são respectivamente de 48,93 bar e 47,2 bar e para o ângulo de pressão máxima de $13,90^\circ$ e $14,61^\circ$. Para o AMR 4, esses valores foram de 44,35 bar e $16,45^\circ$.

**Figura 4.44 – Pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do motor para a avaliação das malhas geradas pela variação dos níveis de AMR. Fonte: Autor**

Para a taxa de liberação de calor (Figura 4.45), também verifica-se que os resultados para o AMR 2 e AMR3 são próximos entre si, e que o AMR4 se distancia

dos demais. Os valores para a máxima taxa de liberação de calor e seu ângulo do eixo correspondente foram de 101,08J/° e 12,37° para o AMR 2, 94,98J/° e 12,78°, para o AMR 3, 74,26J/°, e 14,52°, para o AMR 4.

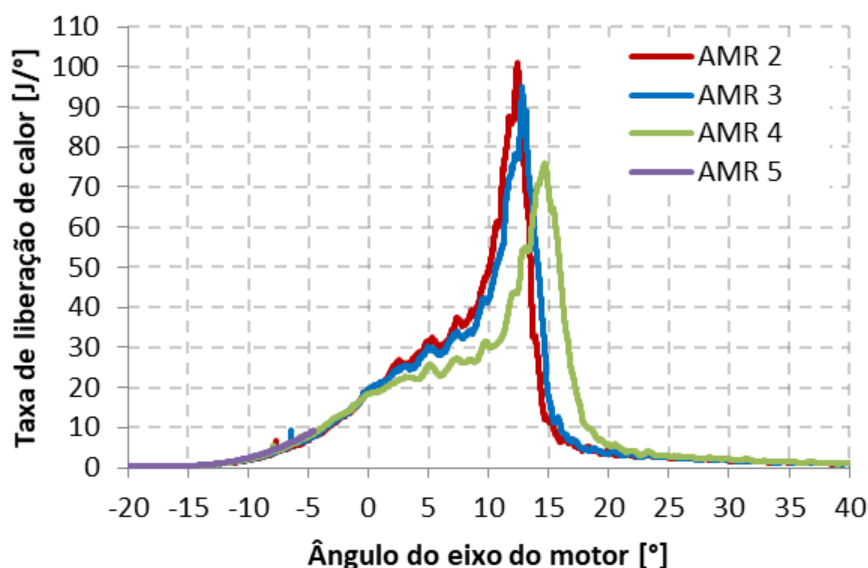


Figura 4.45 – Taxa de liberação de calor em função do ângulo do eixo do motor para a avaliação das malhas geradas pela variação dos níveis de AMR. Fonte:

Autor

Ao analisar a frente de chama, pode-se avaliar a temperatura em função da posição a partir de uma linha que corta a frente de chama, como mostra a Figura 4.46. Nela percebe-se que na frente de chama, representada no gráfico pelo patamar final, as temperaturas para o AMR3, AMR4 e AMR5 são próximas, estando essa temperatura na posição -0,010 mm respectivamente 2611,14 k, 2612,45 k e 2617,51 k. Somente o AMR 2 se distancia das outras malhas, com uma temperatura de 2607,01 k.

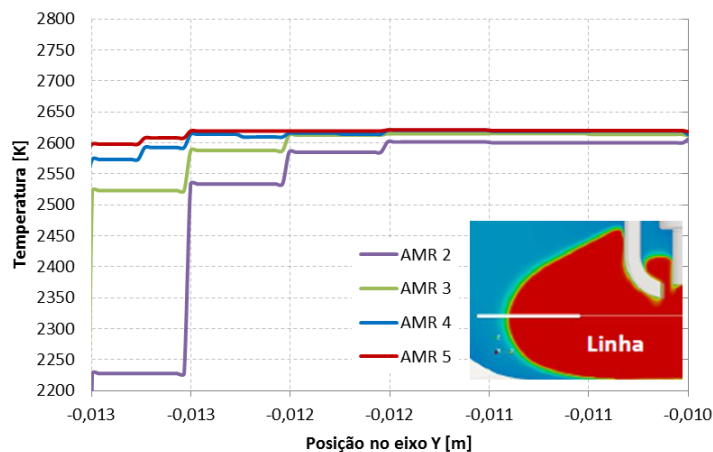


Figura 4.46 – Temperatura ao longo da frente de chama para as quatro malhas avaliadas. Fonte: Autor

A Tabela 4.11 retoma os valores máximos de pressão no cilindro e taxa de liberação de cada AMR e destaca as diferenças percentuais absolutas desses valores entre o AMR 2 e o AMR 3, AMR 3 e o AMR 4. Como pode ser observado, essas diferenças percentuais em relação ao AMR 3 e AMR 4 são superiores a 10% e indicam que a convergência do refino de malha não foi satisfatória. Para uma afirmação segura, seriam necessários os resultados do AMR 5.

Tabela 4.11 – Diferenças percentuais entre os AMR. Fonte: Autor

	AMR 2	AMR 3	AMR 4	Diferença percentual entre o AMR 2 e AMR 3	Diferença percentual entre o AMR 3 e AMR 4
Pressão máxima no cilindro [bar]	48,93	47,92	44,36	2,06%	7,44%
Ângulo de pressão máxima no cilindro [°]	13,90	14,61	16,45	5,10%	12,58%
Máxima taxa de liberação de calor [J/°]	101,08	94,98	74,26	6,04%	21,81%
Ângulo de máxima taxa de liberação de calor [°]	12,37	12,78	14,53	3,28%	13,71%
Temperatura na frente de chama na posição de -0,010m	2607,01	2611,14	2612,45	0,15%	0,05%

Em contrapartida, é ainda necessário levar em consideração o tempo médio de simulação por ciclo. O AMR 2 e o AMR 3 foram simulados com 36 processadores físicos, enquanto o AMR 4 com 96 processadores. Cada ciclo durou 38,87 horas para o AMR 2; 43,10 horas para o AMR 3 e 112,10 horas para o AMR 4.

O AMR 4, com quase o triplo de processadores, demandou um tempo extremamente elevado. Estimando-se por meio de uma regra de três inversa para 18 núcleos físicos dos outros AMR, teríamos um tempo aproximado de 300,53 horas. Um esforço computacional oneroso e quase impraticável para os limites computacionais disponíveis. Dessa maneira, adotando um comprometimento entre o tempo computacional, o refinamento proporcionado e as diferenças percentuais encontradas, optou-se pelo uso do AMR 3 em todas as simulações numéricas tridimensionais desse trabalho.

4.7.4 CONDIÇÕES DE CONTORNO E CONDIÇÕES DE INICIALIZAÇÃO

Em toda simulação numérica é essencial que se configurem corretamente as condições iniciais e de contorno que descrevem o problema. As condições de contorno utilizadas formam as curvas de pressão em função do ângulo de virabrequim para a admissão e exaustão, além das temperaturas de cada subdomínio. As curvas de pressão e o diagrama de válvulas foram tiradas do GT-Power, como explicado anteriormente. As temperaturas de cada subdomínio, devido à dificuldade de obtê-las experimentalmente, foram estimadas com base em dados de motores similares que tiveram temperaturas medidas.. Com base nessas medidas, foram impostos para o pistão o cilindro e o cabeçote à temperatura de 450 k, válvula de admissão a 480 k, válvula de exaustão a 525 k, centelha e o eletrodo da centelha a 550 k, pórtilco de admissão a 425 k e pórtilco de exaustão a 500 k.

Já as condições de inicialização correspondem às pressões e temperatura do cilindro, admissão e exaustão pontuais no momento da abertura da válvula de exaustão. As temperaturas no cilindro e na exaustão foram consideradas iguais para evitar instabilidades por gradientes de temperatura. Foram também especificadas as frações mássicas das espécies em cada uma dessas três regiões, baseadas em outras simulações numéricas realizadas durante esse trabalho, reduzindo assim o custo computacional.

Desse modo, foi constatada a necessidade de no mínimo 3 ciclos de simulação para que os resultados sejam independentes das condições iniciais.

A admissão foi inicializada com uma mistura de oxigênio e nitrogênio molecular, numa fração mássica respectivamente de 0,23 e 0,77. O cilindro e a exaustão foram inicializados com uma mistura de oxigênio, nitrogênio e hidrogênio molecular, água, monóxido e dióxido de nitrogênio, monóxido e dióxido de carbono, radical hidroxila e uma mistura de hidrocarbonetos (metano, isooctano, tolueno, benzeno e ciclopentadieno), quando na presença de gasolina no combustível.

4.7.5 MÉTODO DE SIMULAÇÃO

Todas as simulações realizadas iniciaram-se no momento da abertura da válvula de exaustão, a 136°. O modelo RNG k- ϵ foi utilizado para modelar a turbulência. A centelha elétrica foi dividida em duas fases, a *breakdown phase*, onde no intervalo de 0,5° são liberados 32mJ de energia. Na *glow discharge phase*, também é liberando 32mJ de energia e uma duração de 1ms, que corresponde a 18° na rotação de 3000rpm.

Para o modelamento da combustão, foi utilizado o solver SAGE, sendo utilizados três mecanismos cinéticos químicos: um reconhecido na literatura e idealizado por Abianeh *et al* (ABIANEH, ET AL., 2015), que possui 66 espécies e 215 reações, e dois desenvolvidos pelo trabalho de Cota (COTA, 2018), um com 75 espécies e 343 reações e outro com 115 espécies e 639 reações. Para as emissões de NO_x, foi implementado o modelo de Zeldovich e para a formação de particulados, o modelo de Hiroyasu-NSC.

Assim, foram realizadas sete simulações numéricas tridimensionais, sendo elas divididas em duas etapas. Na primeira etapa foram realizadas três simulações com o combustível E10, na condição de operação 1 e variando somente o mecanismo cinético químico: o mecanismo da literatura desenvolvido por Abianeh (ABIANEH, ET AL., 2015) e os dois desenvolvidos por Cota (COTA, 2018), sendo um com 75 espécies e outro com 115 espécies. Na segunda etapa foram realizadas quatro simulações com a condição de operação e o mecanismo cinético fixos, variando somente o combustível, sendo essas simulações representadas pelas condições de operação de 2 a 5. O mecanismo selecionado para essa segunda etapa foi o mecanismo cinético químico de Cota de 75

espécies, pois ele apresentou a melhor resposta na avaliação realizada na primeira etapa. A Tabela 4.12 sintetiza as simulações realizadas.

Tabela 4.12 – Resumo das simulações tridimensionais realizadas. Fonte: Autor

	Condição de Operação	Combustível	Mecanismo Cinético Químico		
			Espécies	Reações	Autor
Caso 1	1	E10	66	215	(Abianeh, et al., 2015)
Caso 2	1	E10	75	343	(Cota, 2018)
Caso 3	1	E10	115	639	(Cota, 2018)
Caso 4	2	E22	75	343	(Cota, 2018)
Caso 5	3	E50	75	343	(Cota, 2018)
Caso 6	4	E85	75	343	(Cota, 2018)
Caso 7	5	E100	75	343	(Cota, 2018)

4.8 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A metodologia aplicada nessa seção promoveu o modelamento numérico de um motor de combustão interna. Partindo de dados experimentais, realizaram-se simulações unidimensionais. Essas simulações mostraram-se uma boa ferramenta para a análise dos dados experimentais, correção, caso ocorra, de falhas de medição, bem como para a geração de condições de contorno para as simulações tridimensionais. Já as simulações tridimensionais exigem um entendimento dos vários modelos necessários para a reprodução de todos os fenômenos presentes, sendo que os resultados obtidos para avaliação de mecanismos cinéticos químicos serão abordados na próxima seção.

5 RESULTADOS E ANÁLISES

Este capítulo apresenta os resultados obtidos para a validação de mecanismos cinéticos químicos em simulações numéricas tridimensionais, reproduzindo o funcionamento de um motor de combustão interna. A validação é dividida em duas partes. Em primeiro lugar, é apresentado o comportamento dos mecanismos cinéticos químicos em comparação com um da literatura. Em segundo, avaliou-se a sua resposta ao mecanismo de melhor resultado para prever a combustão de diferentes misturas de gasolina e etanol.

5.1 ANÁLISE DOS MECANISMOS CINÉTICOS QUÍMICOS

A Figura 5.1 mostra as curvas de pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do motor para as 3 simulações numéricas e para os experimentos. Como pode ser notado, nenhum dos mecanismos apresentou boa correlação em relação aos dados experimentais. Tanto o mecanismo de Abianeh quanto o de Cota (75 espécies) sobrestimaram a pressão máxima no cilindro, sendo elas respectivamente 52,41 bar e 49,02 bar. Enquanto para o experimental, a pressão máxima no cilindro foi de 41,41 bar. Em contrapartida, o mecanismo de Cota (115 espécies) subestimou a pressão, sendo a máxima pressão alcançada de 23,57 bar.

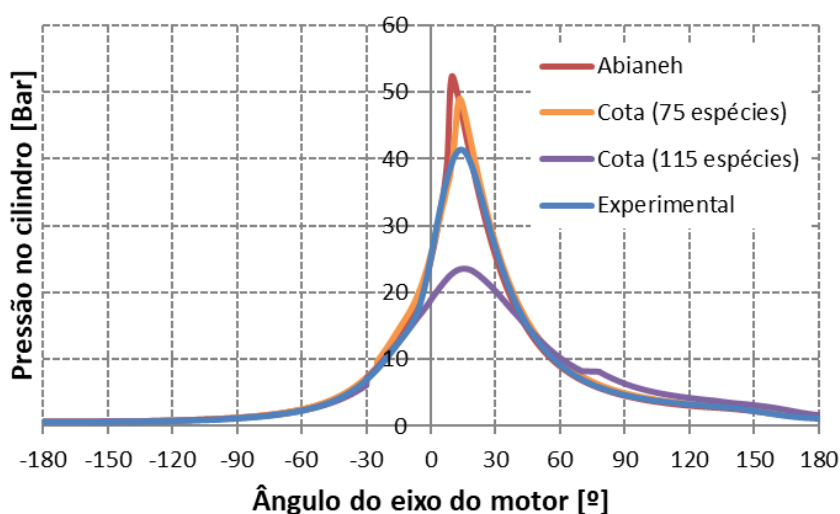


Figura 5.1 - Pressão no cilindro por ângulo do eixo do motor para os casos 1, 2 e 3 em comparação aos dados experimentais). Fonte: Autor

As diferenças percentuais em relação aos dados experimentais nos casos 1, 2 e 3 foram, respectivamente, 26,57%, 18,37% e -43,08%. Em relação ao posicionamento dessa pressão máxima do cilindro, tanto o mecanismo de Abianeh quanto o de Cota (75 espécies) se localizam adiantados em relação ao experimental, que foi 14,01°. Porém, no mecanismo de Abianeh, esse adiantamento foi de 29,91%, um valor bem elevado quando se compara com Cota (75 espécies), que foi de 4,14%. Já no mecanismo de Cota (115 espécies), o ponto de pressão máxima no cilindro ocorreu após o esperado, com uma diferença percentual de 23,92%.

Analisando a área da curva de pressão, pode-se correlacioná-la pelo trabalho realizado no período em que as válvulas estão fechadas, calculando assim o IMEP. Os mecanismos de Abianeh e Cota (75 espécies), mesmo apresentando uma pressão máxima mais intensa, tiveram uma diferença percentual de -3,74% e 3,68% em relação ao experimental para o IMEP. Em contrapartida, o mecanismo de Cota (115 espécies) teve uma diferença de -92,95%, sendo esses valores absolutos apresentados na Tabela 5.1.

Em relação à energia liberada, como pode ser visto na Figura 5.2 pode-se notar que o mecanismo de Abianeh e o mecanismo de Cota (75 espécies) apresentam o mesmo comportamento, distanciam-se do esperado, porém com intensidades diferentes. Nesses mecanismos a taxa de liberação de calor sobe bruscamente, chegando ao ponto máximo de 192,52 J/° para o Abianeh e 95,63 J/° para Cota (75 espécies). Logo após esse ápice, a taxa cai drasticamente, não seguindo o comportamento esperado, como visto na curva do GT-Power, onde o ponto máximo foi de 33,76 J/°. O mecanismo de Cota (115 espécies) teve uma taxa de liberação de calor mais lenta e por um período mais longo.

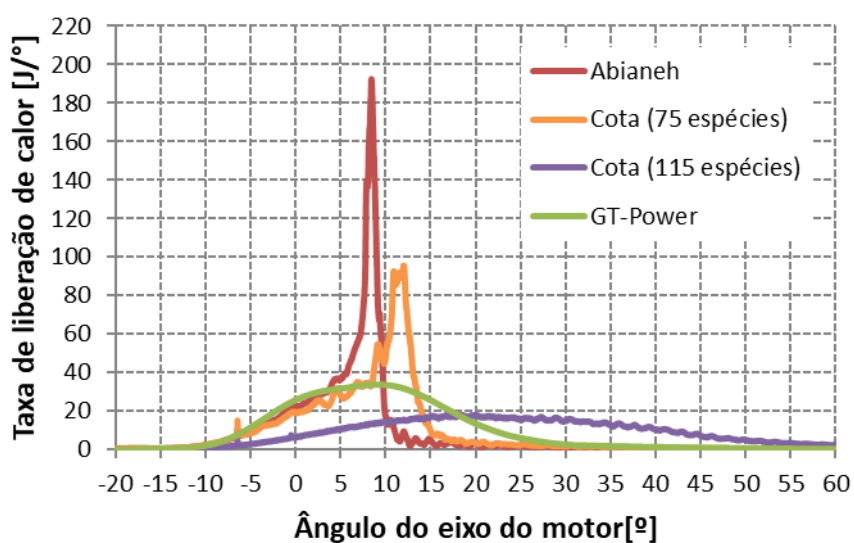


Figura 5.2 - Taxa de liberação de calor por ângulo do eixo do motor para os casos 1, 2 e 3 em comparação aos dados do GT-Power. Fonte: Autor

Esse comportamento da taxa de liberação de calor também pode ser analisado pela fração de massa queimada, mostrada na Figura 5.3. Nela pode-se observar que tanto o mecanismo do Abianeh quanto o de Cota (75 espécies) apresentam uma leve deformação da fração de massa queimada em relação à forma de “S” esperada, como observado na curva do GT-Power. O mecanismo de Cota (115 espécies) apresenta uma duração de queima mais longa, visto que somente a 60° de ângulo de eixo do motor ele está próximo da totalidade do consumo do combustível.

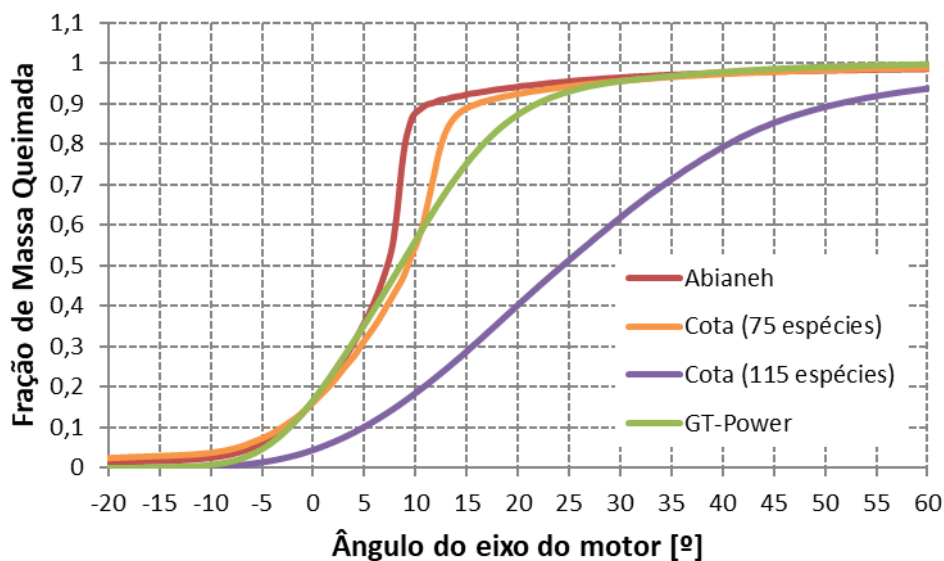


Figura 5.3 - Fração de massa queimada por ângulo do eixo do motor para os casos 1, 2 e 3 em comparação aos dados do GT-Power . Fonte: Autor

Uma outra maneira de avaliar a velocidade dessa reação é pelo parâmetro MBF 10-90. Como os valores de MBF experimentais e do GT-Power foram bem próximos, essa comparação será realizada em relação aos dados experimentais. Assim, como esperado pela elevada taxa de liberação de calor, tem-se uma velocidade de combustão mais rápida para o mecanismo de Abianeh e o de Cota (75 espécies). Suas diferenças percentuais em relação ao MBF 10-90 do experimental ($20,11^\circ$) são respectivamente de -30,28% e -4,77%. O mecanismo Cota (115 espécies) tem uma velocidade de queima extremamente baixa, com uma diferença de 131,27% em relação aos dados experimentais.

Dessa maneira, pode-se avaliar também o centróide dessa combustão. O mecanismo de Abianeh apresenta a primeira metade da queima bem próxima ao experimental, com uma diferença de 0,18% para o MBF 50 e de -0,24% para o MBF 10-50. Em contrapartida, a segunda metade da combustão ficou bem acelerada, como esperado pelo pico da taxa de liberação de calor, sendo a diferença do MBF 50-90 de -59,02%.

Já o mecanismo de Cota (75 espécies) apresenta uma desaceleração da primeira metade da combustão, com uma diferença percentual em relação ao experimental de 26,65% para o MBF 50 e 25,04%, para o MBF 10-50. A sua segunda metade da combustão foi acelerada, como pode ser também notado pelo pico na taxa de liberação

de calor e pela diferença de -33,29% em relação ao MBF 50-90. Assim, os valores absolutos dos MBF, assim como os outros valores quantitativos analisados até momento, pode ser recapitulado e sintetizado pela Tabela 5.1, sendo que as diferenças percentuais em relação aos dados experimentais são mostradas na Tabela 5.2.

Tabela 5.1 – Comparação entre os dados experimentais, GT-Power, caso 1 (Abianeh), caso 2 (Cota 75 espécies) e caso 3 (Cota 115 espécies). Fonte: Autor

Parâmetro	Experimental	GT-Power	Abianeh	Cota (75 espécies)	Cota (115 espécies)
IMEP [bar]	6,97	6,67	6,71	7,22	0,49
Pressão máxima no cilindro [bar]	41,41	41,86	52,41	49,02	23,57
Ângulo de pressão máxima [°]	14,01	13,87	9,82	13,43	17,36
MBF 50 [°]	7,24	7,09	7,25	9,24	24,37
MBF 10-90 [°]	20,11	20,22	14,02	19,15	46,50
MBF 10-50[°]	9,83	10,02	9,81	12,29	19,46
MBF 50-90[°]	10,28	10,20	4,21	6,86	27,04

Tabela 5.2 – Diferença percentual do caso 1 (Abianeh), do caso 2 (Cota 75 espécies) e do caso 3 (Cota 115 espécies) em relação aos dados experimentais. Fonte: Autor

Parâmetro	Abianeh	Cota (75 espécies)	Cota (115 espécies)
IMEP [bar]	-3,74%	3,68%	-92,95%
Pressão máxima no cilindro [bar]	26,57%	18,37%	-43,08%
Ângulo de pressão máxima [°]	-29,91%	-4,14%	23,92%
MBF 50 [°]	0,18%	27,65%	236,52%
MBF 10-90 [°]	-30,28%	-4,77%	131,24%
MBF 10-50[°]	-0,24%	25,04%	97,93%
MBF 50-90[°]	-59,02%	-33,29%	163,09%

Pode-se também avaliar esses mecanismos de forma qualitativa pela análise do desenvolvimento da chama na câmara de combustão. A Figura 5.4 mostra a razão de equivalência para os planos normais ao eixo x e ao eixo y para os três casos simulados, sendo a escala de cores as razões de equivalência. Como pode ser visto, a mistura de ar-combustível não se encontra homogênea pelo cilindro, ocorrendo em regiões próximas à parede do cilindro pobre em combustível, ilustrada pela cor azul, e à daquele de regiões muito ricas, ilustradas pela cor vermelha.

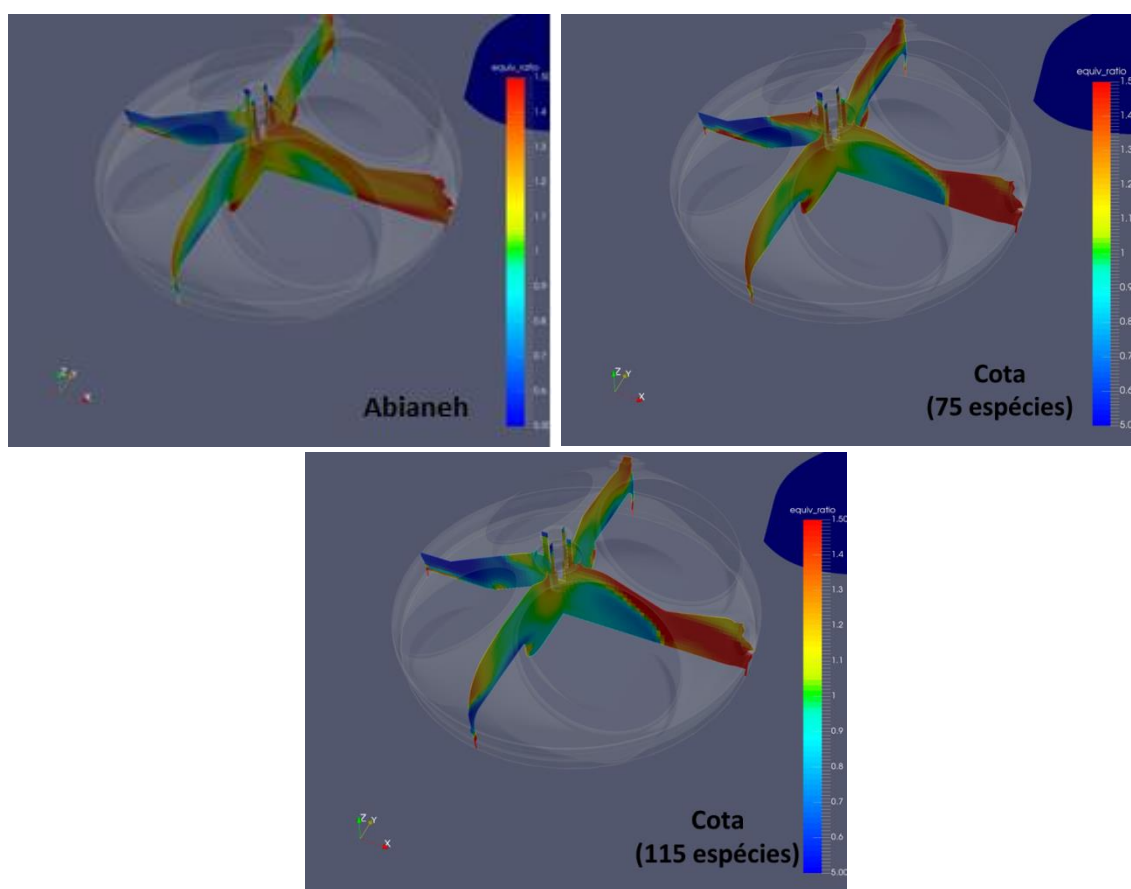


Figura 5.4 - Razão de equivalência a $-22,5^\circ$ de eixo do motor, instantes antes da centelha elétrica ($-18,5^\circ$). Fonte: Autor

Na região próxima à centelha elétrica, a mistura se encontra levemente rica. Em relação à mistura global, a massa de ar aprisionada no cilindro foi menor em todas as simulações comparada com o GT-Power, cujo valor foi de 308,5 mg de ar. Em relação a esse valor, a simulação com o mecanismo do Abianeh apresentou uma diferença percentual de -5,19%, a com o mecanismo de Cota (75 espécies) foi de -5,39% e o Cota (115 espécies) foi de -3,49%.

Da Figura 5.5 à Figura 5.9, pode-se avaliar o deslocamento da frente de chama em planos normais ao eixo x e ao eixo y, cuja escala de cores da temperatura está em graus kelvin. Na Figura 5.5, a frente de chama no mecanismo do Abianeh encontra-se levemente deslocada para a esquerda, enquanto nos mecanismos de Cota elas estão mais centralizadas. Este posicionamento é influenciado pela razão de equivalência local e conforme esperado, o mecanismo de Cota (115 espécies) possui um desenvolvimento de chama mais lento.

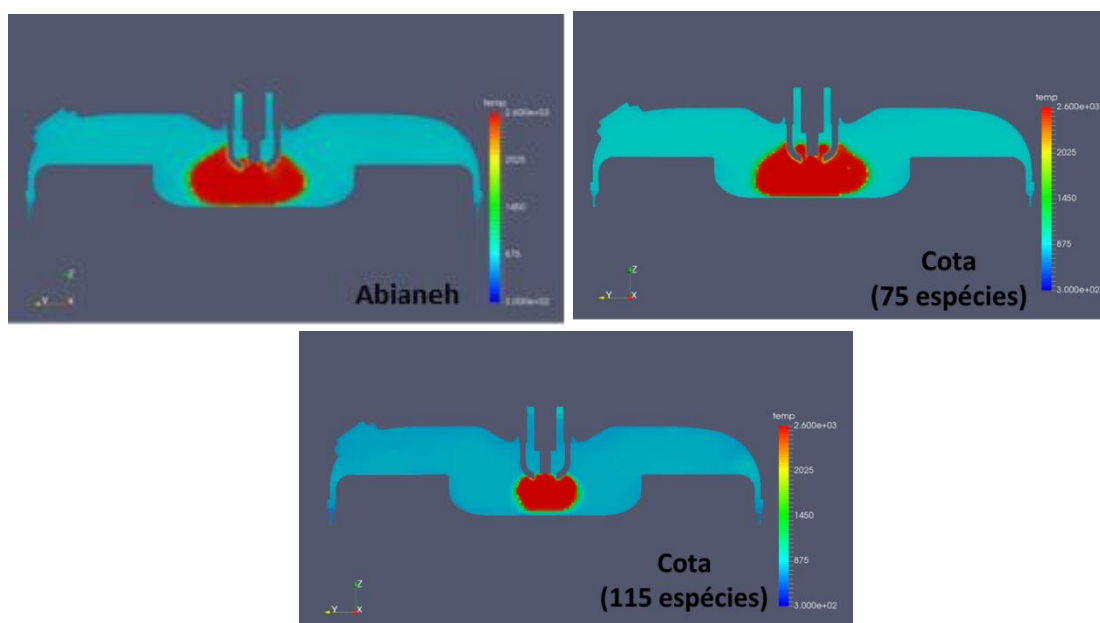


Figura 5.5 – Frente de chama no plano normal ao eixo x a $-7,5^\circ$. Fonte: Autor

A primeira metade da combustão se desenvolve, de forma similar, entre o mecanismo de Abianeh e Cota (75 espécies) no plano normal ao eixo x, como mostram a Figura 5.6 e a Figura 5.7. Já o mecanismo de Cota (115 espécies) apresenta velocidades menores que a esperada.

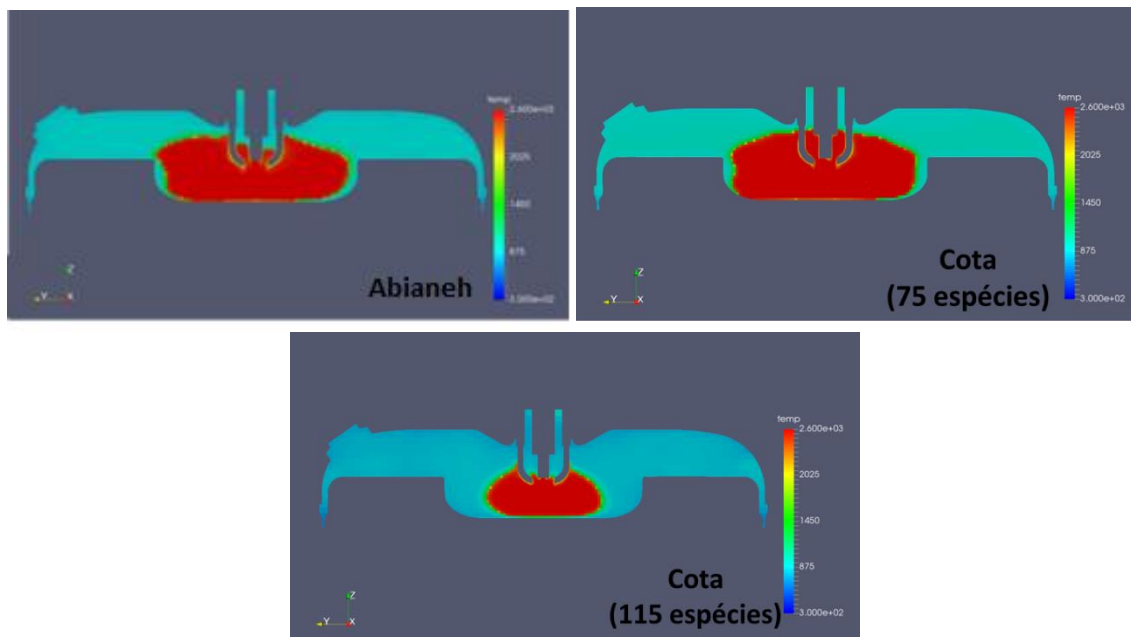


Figura 5.6 - Frente de chama no plano normal ao eixo x a $-2,5^\circ$, próximo a 10% da fração de massa queimada experimental. Fonte: Autor

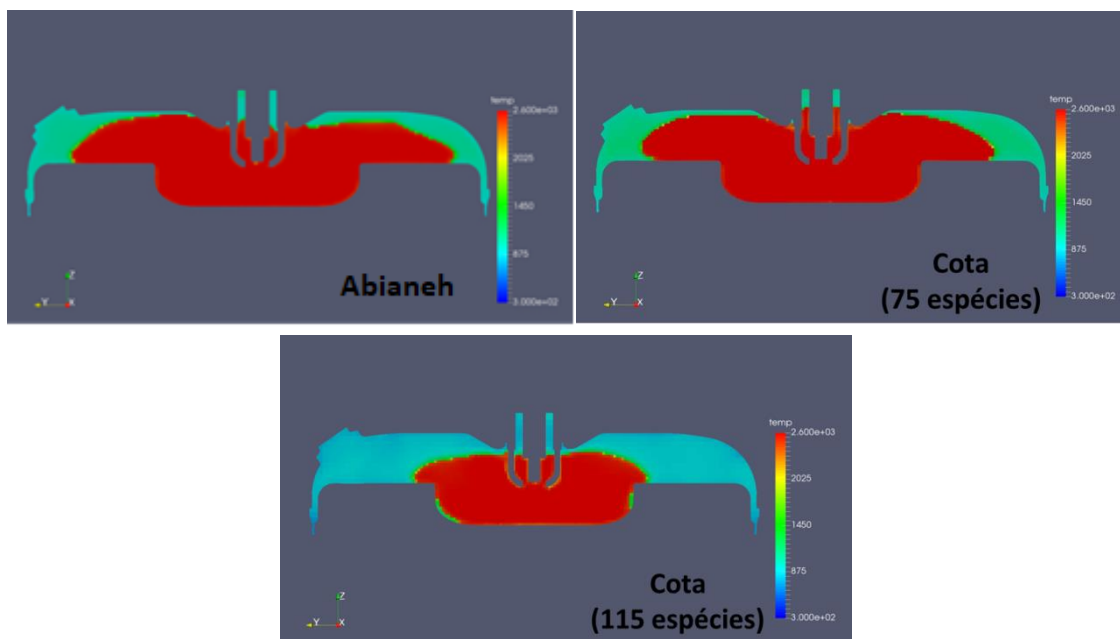


Figura 5.7 - Frente de chama no plano normal ao eixo x a 8° , sendo o MBF 50 experimental de $7,24^\circ$. Fonte: Autor

Analisando o mesmo momento da Figura 5.7, a 8° de ângulo do eixo do motor pelo plano normal ao eixo y, vemos na Figura 5.8 que a frente de chama no mecanismo de Cota (75 espécies) encontrou-se com as paredes do cilindro em uma área maior que a

do mecanismo de Abianeh, sendo esse comportamento amplificado na Figura 5.9. Quando se compara com a Figura 5.4, as regiões ainda em verde na Figura 5.9 correspondem a áreas pobres em combustível.

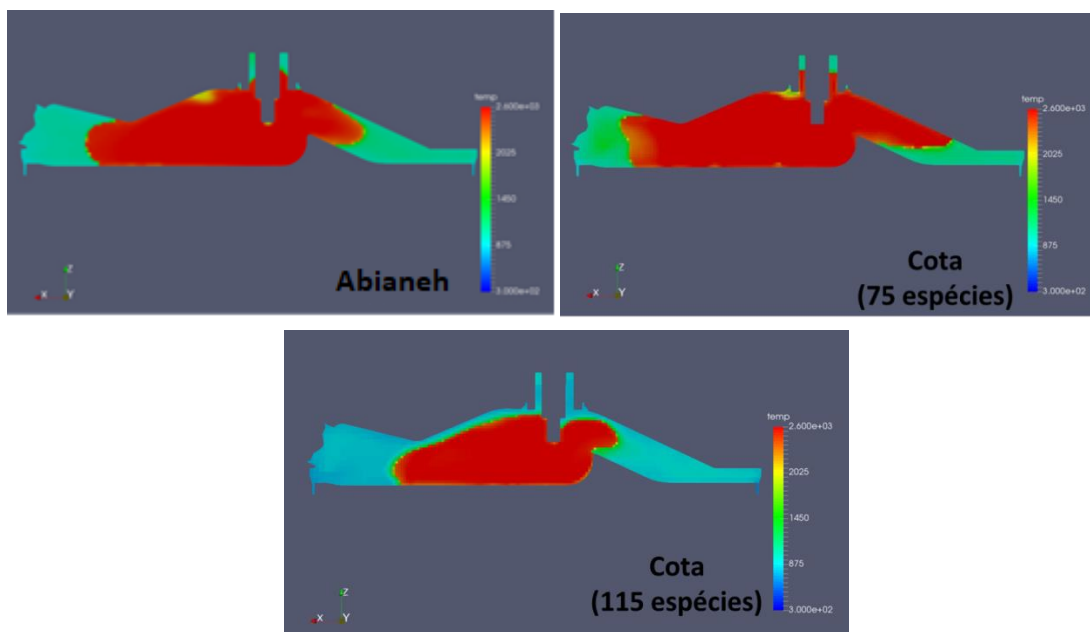


Figura 5.8 - Frente de chama no plano normal ao eixo y a 8° , sendo o MBF 50 experimental de $7,24^\circ$. Fonte: Autor

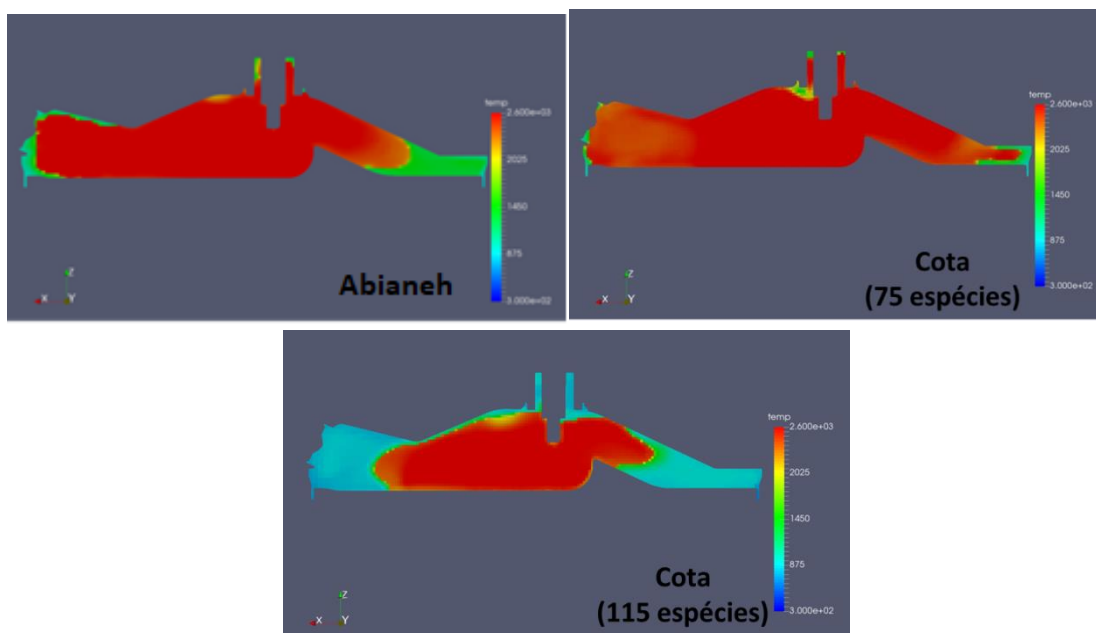


Figura 5.9 - Frente de chama no plano normal ao eixo y a 13° . Fonte: Autor

Essa análise qualitativa do desenvolvimento da frente de chama ressalta que as diferenças encontradas em relação ao mecanismo de Abianeh e Cota (75 espécies) são mais influenciadas pela formação da mistura ar-combustível e sua homogeneidade do que o mecanismo cinético químico. Já para o mecanismo de Cota (115 espécies), essa análise qualitativa só veio ilustrar visualmente a sua baixa velocidade de queima.

Por último, podemos comparar a eficiência da conversão de combustível, η_f e a eficiência da combustão, η_c , em relação aos resultados do GT-Power, como mostra a Tabela 5.3. O mecanismo de Cota (75 espécies) apresenta os melhores resultados com diferenças percentuais abaixo de 5% nas duas eficiências calculadas.

Tabela 5.3 – Eficiências de conversão de combustível e da combustão. Fonte: Autor

	GT-Power	Abianeh	Cota (75 espécies)	Cota (115 espécies)
η_f [%]	33,45	29,49	31,94	27,21
Diferença percentual do η_f	-	-11,83%	-4,50%	-18,64%
η_c [%]	88,07	82,06	86,39	83,40
Diferença percentual do η_c	-	-6,82%	-1,91%	-5,30%

Dessa forma, entre os mecanismos cinéticos desenvolvidos por Cota, o de 75 espécies apresenta melhores resultados em relação ao de 115 espécies, cujo processo de combustão ocorre lentamente. Talvez sejam necessários no mecanismo de 115 espécies alguns ajustes em relação aos expoentes da equação de Arrhenius ((3.10), que estão diretamente ligados à velocidade das reações químicas.

O mecanismo desenvolvido por Cota de 75 espécies apresentou um comportamento semelhante e em alguns pontos melhor do que o mecanismo de Abianeh, mecanismo da literatura. Entre os pontos de melhor desempenho, cabe destacar a pressão máxima no cilindro, a taxa de liberação de calor com o pico menos intenso, a eficiência de conversão de combustível, a eficiência da combustão e o MBF 10-90, como mostra a Figura 5.10.

Em contrapartida, o mecanismo de Cota com 75 espécies teve um pior desempenho em relação à primeira metade da combustão, sendo a velocidade de queima mais lenta nesse período. Ele apresenta diferenças percentuais em torno de 26% para o

MBF 50 e MBF 10-50 em relação aos dados experimentais, sendo que o mecanismo de Abianeh apresenta diferenças menores que 0,5%.

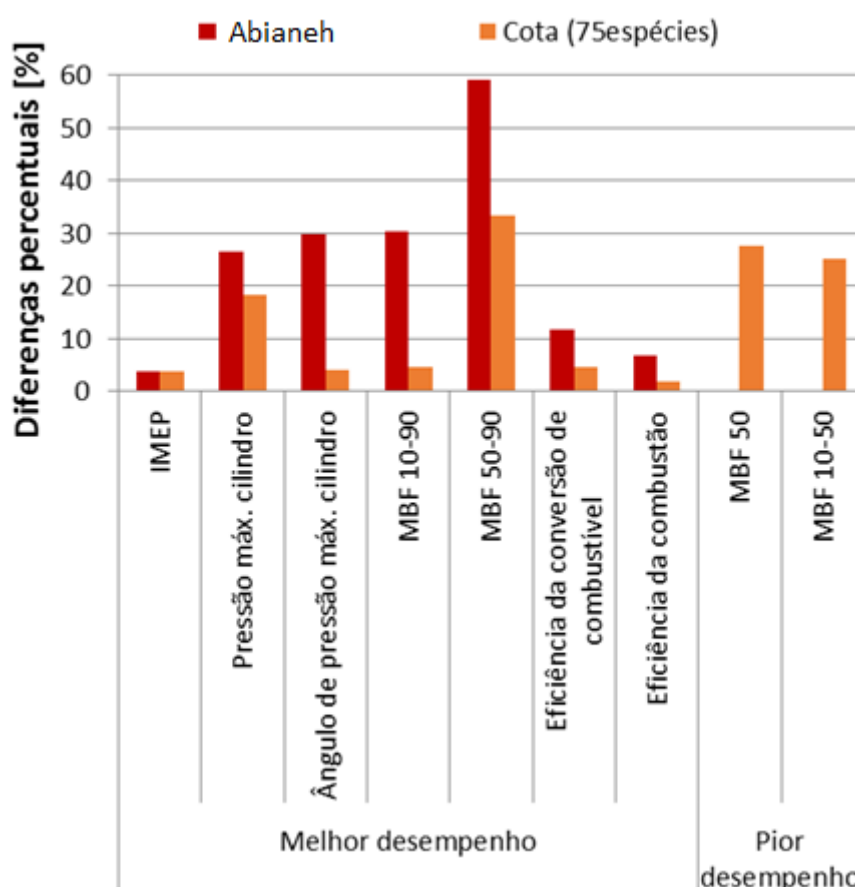


Figura 5.10 - Comparação das diferenças percentuais de cada mecanismo em relação aos dados experimentais e dados do GT-Power. Fonte: Autor

Em relação ao tempo de simulação, o mecanismo de Abianeh demorou 90,45 horas por ciclo do motor e o Cota (75 espécies), 91,85. Uma diferença de tempo de 1,54% entre simulações realizadas no *Cluster* utilizando 18 núcleos físicos.

Dessa primeira etapa, pode-se concluir que de modo geral o mecanismo de Cota com 75 espécies apresenta melhores resultados que o da literatura. Entretanto, ele precisa ainda de alguns ajustes em relação às velocidades de queima, pois a primeira metade da combustão (MBF 10-50) ocorre mais lenta que o esperado, e a segunda metade (50-90), mais acelerada. Como consequência, a análise do MBF 10-90 é mascarada, apresentando uma diferença inferior a 5% em relação aos dados experimentais. Esses ajustes de velocidade devem impactar de maneira benéfica, a fim de evitar o elevado pico na taxa de liberação de calor, como visto na Figura 5.2.

5.2 COMPORTAMENTO DO MECANISMO CINÉTICO QUÍMICO EM DIFERENTES COMBUSTÍVEIS

Nessa segunda etapa, o comportamento do mecanismo de Cota com 75 espécies, que apresentou o melhor resultado entre os dois testados, é avaliado por meio de simulações numéricas tridimensionais para 4 diferentes combustíveis na mesma condição de operação: 3000 rpm, 6 bar de BMEP e razão volumétrica de compressão de 11,5:1. O caso 4, como descrito na metodologia, operou com o combustível E22, o caso 5, com o E50, o caso 6, com o E85, e o caso 7, com o E100.

A Figura 5.11 e a Figura 5.12 apresentam os resultados do caso 4, com o combustível E22. A simulação numérica reproduziu o mesmo comportamento para a pressão do cilindro em relação aos dados experimentais, como pode ser visto na Figura 5.11, porém com menor intensidade, de maneira análoga aos resultados com o E10 (Caso 2), sendo a diferença do pico de pressão máximo de 11,03%. Em relação à posição do pico máximo de pressão, essa diferença em módulo foi de 0,81%, apresentando assim, um leve adiantamento e confirmando a boa concordância entre as duas curvas. Pode-se também relacionar a área da curva de pressão no período de combustão pelo IMEP, sendo esse valor para a simulação numérica de 7,43 bar e o experimental, de 7,09 bar, uma diferença percentual de 4,75%.

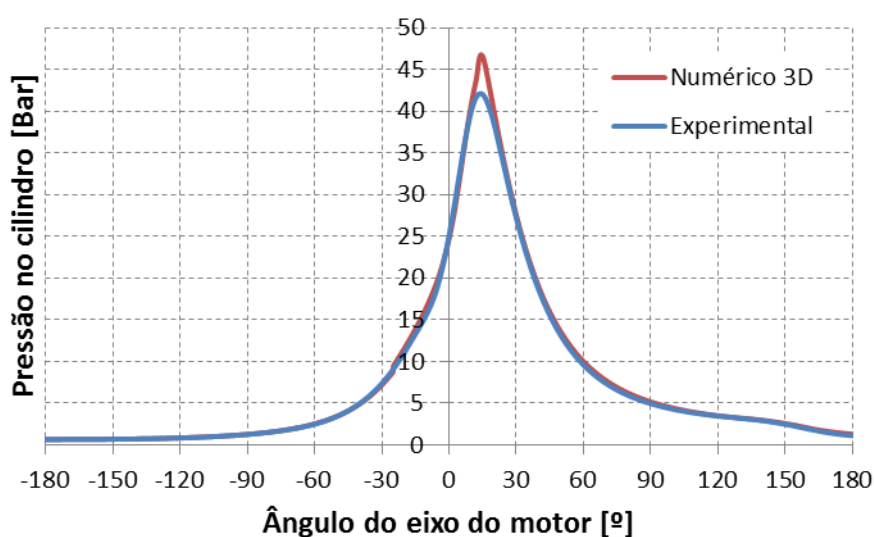


Figura 5.11 - Pressão no cilindro numérico e experimental por ângulo do eixo do motor para o caso 4 (combustível E22). Fonte: Autor

Em relação à energia liberada, pode-se notar pela taxa de liberação de calor numérica 3D (Figura 5.12, pelas linhas cheias) que a segunda metade do processo de combustão ocorre de uma maneira inicialmente mais intensa, apresentando um pico de aproximadamente $70\text{J}/^\circ$ no ângulo de $12,71^\circ$. Logo após, a taxa de liberação de calor numérico diminui drasticamente de intensidade quando comparada ao resultado do GT-Power.

Esse comportamento pode ser confirmado pela fração de massa queimada, também na Figura 5.12, pelas linhas pontilhadas. A linha vermelha representa os dados numéricos 3D e a linha verde, os dados do modelo completo do GT-Power. Apesar de ser possível calcular os valores de MBF a partir da fração de massa queimada, esses valores serão comparados em relação aos dados experimentais, pois no modelo completo utilizou-se os expoentes de Wiebe para o cálculo da combustão. Nessa e nas próximas simulações numéricas tridimensionais discutidas serão utilizadas essa mesma linha de raciocínio.

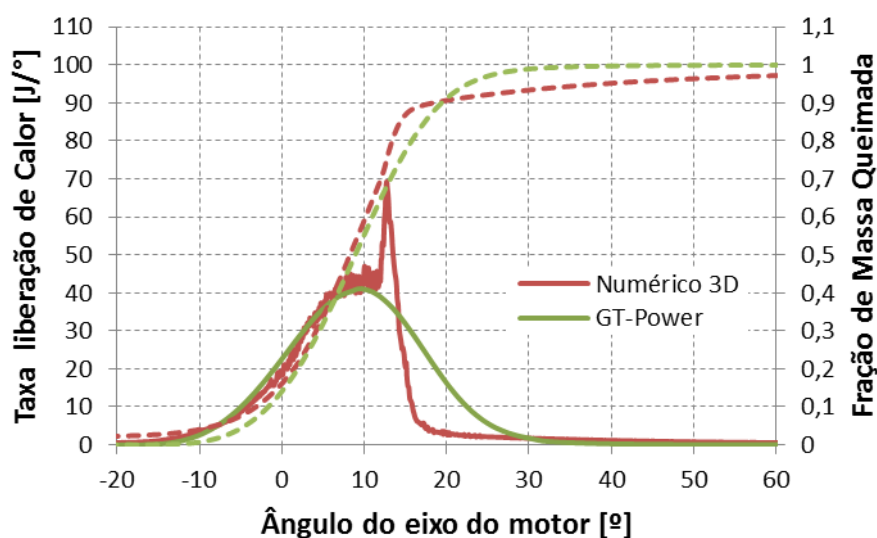


Figura 5.12 - Taxa de liberação de calor (linha cheia), fração de massa queimada (linha pontilhada) numérico e do GT-Power por ângulo do eixo do motor para o caso 4 (combustível E22). Fonte: Autor

A curva da fração de massa queimada possui uma forma levemente deformada em relação ao “S” esperado, grande parte em consequência do pico da taxa de liberação de calor. A velocidade da combustão numérica é menor que a experimental, como pode

ser visto pela duração maior do processo de combustão quando se analisa o parâmetro MBF 10-90. A simulação numérica apresenta 21,54° de MBF 10-90 e o dado experimental é de 19,51°, uma redução de 10,42%.

Pode-se analisar essa desaceleração pela divisão do parâmetro MBF 10-90 em dois intervalos simétricos, representados pelos parâmetros MBF 10-50 e MBF 50-90. O MBF 10-50 numérico foi de 11,41° e o experimental, de 9,95°. Já para o MBF 50-90 têm-se respectivamente os valores de 10,12° e 9,53°. A desaceleração é mais intensa na primeira metade da combustão com uma diferença em relação aos dados experimentais de 14,74% e a segunda metade, com 5,91%. O centro dessa combustão é levemente deslocado com 7,41% de diferença para o MBF 50, onde o numérico se posicionou 8,33° e o experimental, 7,75°.

A Figura 5.13 e a Figura 5.14 apresentam os resultados do caso 5 com o combustível E50. A curva de pressão no cilindro numérico em relação à experimental se aproximou de uma forma melhor que as simulações anteriores, reproduzindo bem o comportamento esperado e com uma diferença menos intensa no pico de pressão máxima, sendo esse valor de 1,99%, como pode ser visto na Figura 5.13. Em contrapartida, houve um deslocamento maior do ângulo de pressão máxima, 16,44° na simulação numérica contra 14,67° no dado experimental, uma diferença percentual de 12,08%. Em relação ao IMEP, aumentou-se a diferença percentual entre os dados para 8,27% (7,70 bar no numérico e 7,12 bar no experimental).

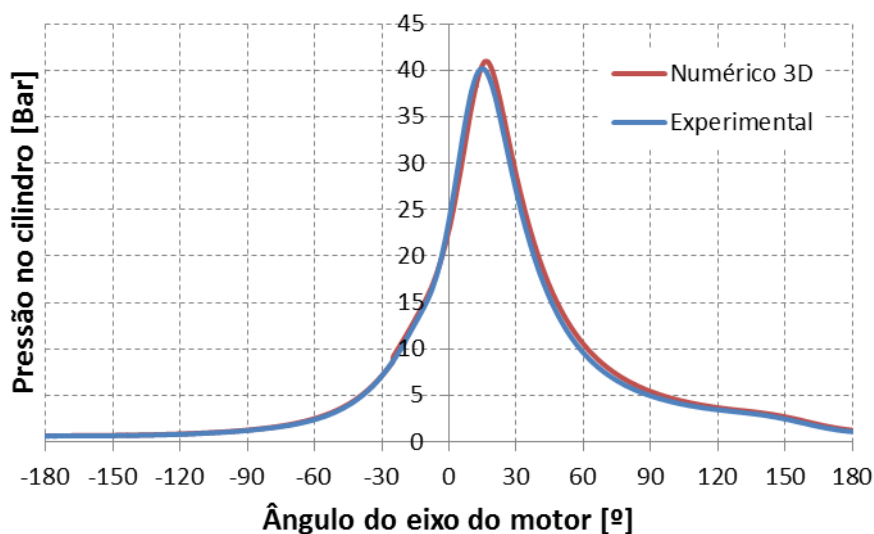


Figura 5.13 - Pressão no cilindro numérico e experimental por ângulo do eixo do motor para o caso 5 (combustível E50). Fonte: Autor

A taxa de liberação de calor, como mostra a Figura 5.14 pelas linhas cheias, não apresentou o pico intenso nem uma queda brusca como no caso 4, aproximando-se melhor na sua forma do calculado pelo GT-Power. Porém, até aproximadamente 8° de eixo do motor a taxa de liberação foi menos intensa.

Com relação à fração de massa queimada, a curva não apresentou uma deformação como nos casos anteriores, tendo o comportamento próximo do esperado. Assim, pela fração de massa queimada, a velocidade da combustão continua ainda menor, como pode ser visto na Figura 5.14 pelas linhas pontilhadas. A diferença percentual entre MBF 10-90 é de 21,60%, sendo o numérico 24,61° e o experimental, 20,24°. Assim, avaliando o centróide da combustão, tem-se na sua primeira metade uma diferença percentual de 16,57% para o MBF 10-50 e 26,75%, para o MBF 50-90, intensificando a desaceleração da segunda metade da combustão. Já em relação ao seu posicionamento, tem-se 30,09% de diferença percentual entre os MBF 50, sendo o numérico localizado a 10,57° e o experimental a 8,12°.

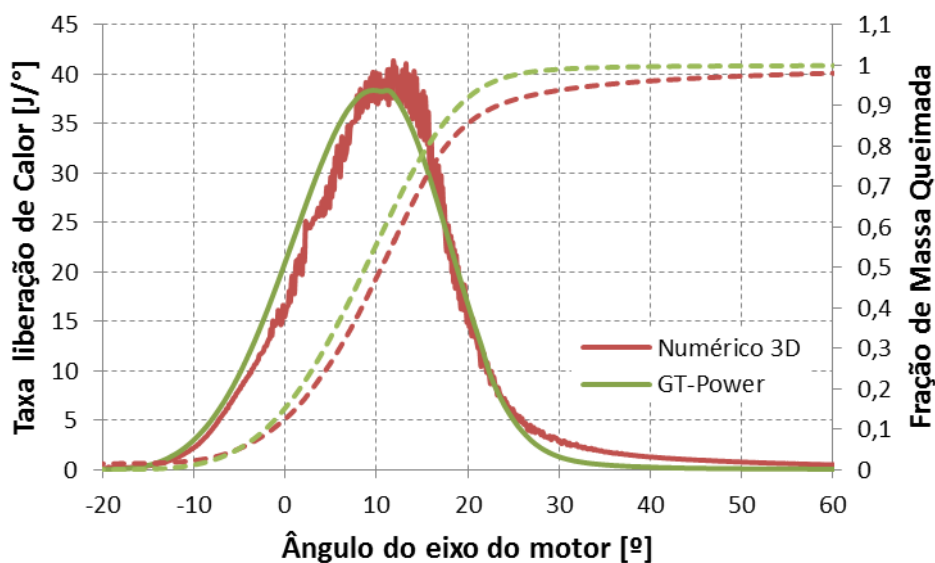


Figura 5.14 - Taxa de liberação de calor (linha cheia), fração de massa queimada (linha pontilhada) numérico e do GT-Power por ângulo do eixo do motor para o caso 5 (combustível E50). Fonte: Autor

A Figura 5.15 e a Figura 5.16 apresentam os resultados do caso 6 com o combustível E85. Como pode ser visto na Figura 5.14, houve uma boa concordância na forma das curvas numéricas e experimentais, com um leve desvio visual em relação à intensidade e ao posicionamento do pico de pressão no cilindro. Quantitativamente, essas diferenças em relação ao experimental foram de 1,21% para a pressão máxima no cilindro e 12,23% para o ângulo de pressão máxima. Já para o IMEP, temos 10,30% de diferença percentual, sendo o numérico de 7,88 bar e o experimental, de 7,14 bar.

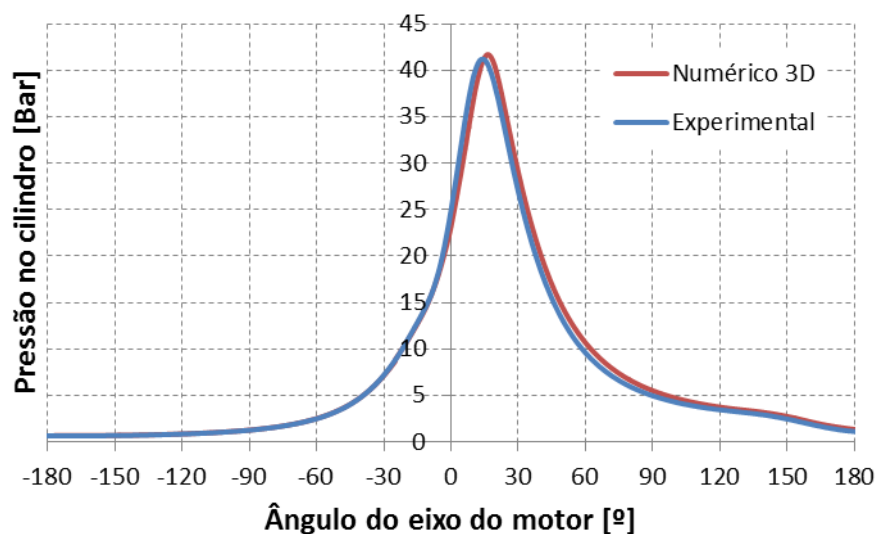


Figura 5.15 - Pressão no cilindro por ângulo do eixo do motor para o caso 6 (combustível E85) em comparação aos dados experimentais. Fonte: Autor

A Figura 5.16 mostra pelas linhas cheias a taxa de liberação de calor. Pode ser percebido que aproximadamente entre -5° a 6° a taxa de liberação de calor numérica torna-se levemente menos intensa que a do GT-Power. Em contrapartida, após 6° , temos a inversão desse comportamento, sendo que nesse período a taxa de liberação mantém-se por um período mais longo do que o experimental.

Também na Figura 5.16, pelas linhas pontilhadas, pode-se analisar a fração de massa queimada. Em relação ao centro da combustão, temos uma diferença percentual de 30,69% no ponto de MBF 50, sendo o numérico $10,30^{\circ}$ e o experimental, $7,88^{\circ}$. A combustão continua desacelerada em relação ao experimental, como pode ser visto no gráfico, com 19,67% de diferença para o MBF 10-90. Em relação ao centróide da combustão, ainda temos as duas metades da combustão mais lentas, sendo a diferença da segunda metade um pouco maior. Em valores, temos 16,08% de diferença percentual em relação ao experimental para o MBF 10-50 e 23,21% para o MBF 50-90.

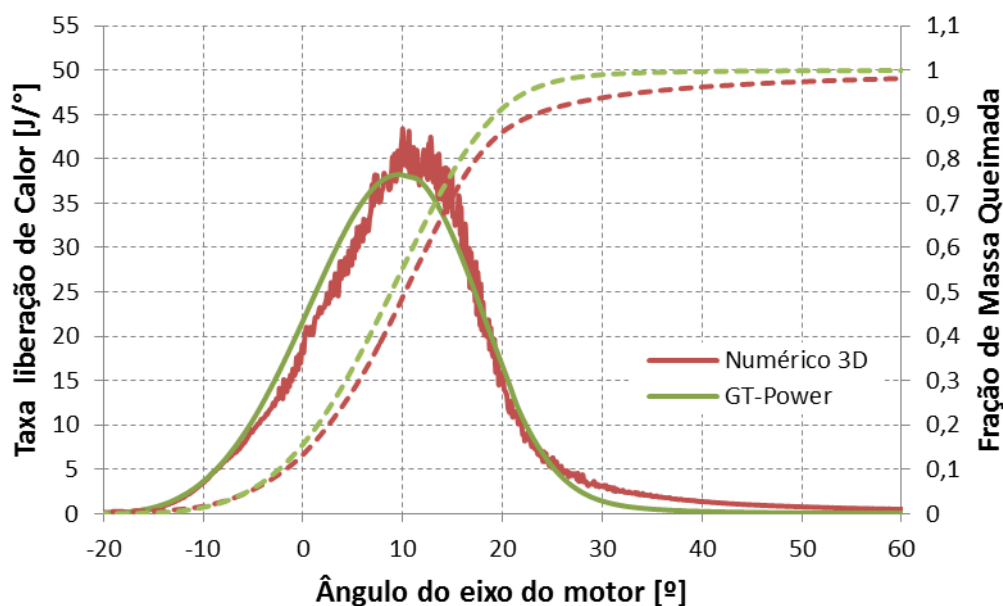


Figura 5.16 - Taxa de liberação de calor (linha cheia), fração de massa queimada (linha pontilhada) numérico e GT-Power por ângulo do eixo do motor para o caso 6 (combustível E85). Fonte: Autor

Por último, a Figura 5.17 e a Figura 5.18 mostram os resultados do caso 7 com o combustível E100. Na Figura 5.17 pode-se visualizar que o deslocamento do ângulo de pressão máxima torna-se mais expressivo, sendo essa diferença percentual em relação ao experimental de 19,89%. Entretanto, a pressão máxima no cilindro entre as duas curvas apresentou uma diferença de 1,44%, porém cabe ressaltar que qualitativamente as duas curvas possuem uma boa coerência na sua forma. Assim, para o IMEP, temos 8,05 bar para a simulação numérica e 7,09 para os dados experimentais, com uma diferença percentual de 13,54%.

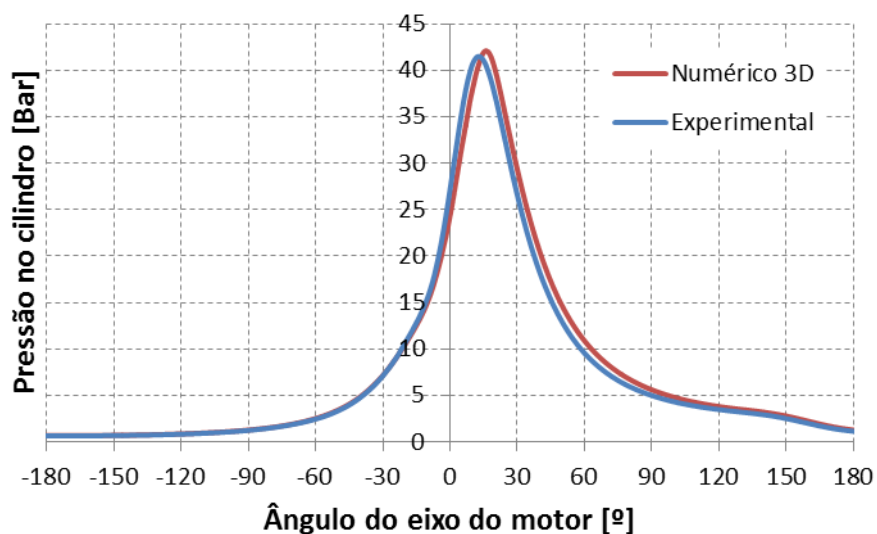


Figura 5.17 - Pressão no cilindro por ângulo do eixo do motor para o caso 7 (combustível E100) em comparação aos dados experimentais. Fonte: Autor

Na Figura 5.18 pode-se observar, pelas linhas cheias, que a taxa de liberação de calor torna-se mais intensa que a calculada no GT-Power. Após o ângulo aproximado de 8° , elas se distanciam mais e depois voltam a se aproximar. Por fim, em relação ao centro da combustão, temos um MBF 50 de $9,95^\circ$ para a simulação numérica e $6,95^\circ$ para o experimental, com uma diferença de 43,08%. A combustão também continua mais lenta, com uma diferença de 14,78% no MBF 10-90, sendo que as duas metades da combustão apresentaram uma diferença percentual em relação ao experimental de: 14,81% para o MBF 10-50 e 14,75% para o MBF 50-90.

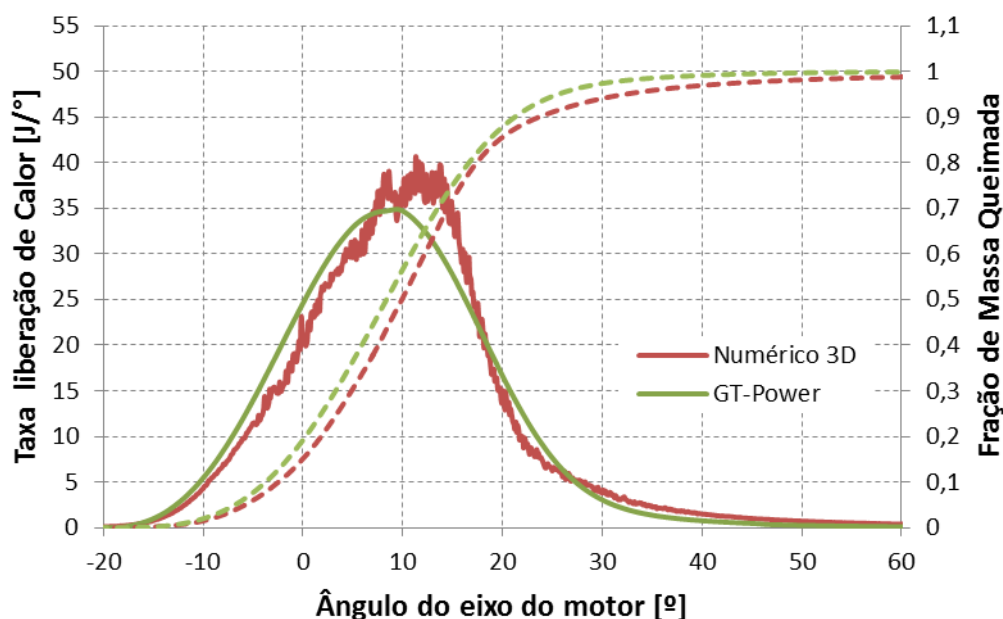


Figura 5.18 - Taxa de liberação de calor (linha cheia), fração de massa queimada (linha pontilhada) numérico e do GT-Power por ângulo do eixo do motor para o caso 7 (combustível E100). Fonte: Autor

Assim, após ser apresentado o resultado individual dos casos 4, 5, 6 e 7, pode-se realizar uma análise em conjunto, ressaltando assim o comportamento do mecanismo cinético para a reprodução de cada combustível, visto que todos esses casos encontram-se à mesma rotação de 3000 rpm, mesma carga de aproximadamente 6 bar BMEP e mesma razão volumétrica de compressão.

Dessa forma, pode-se começar pelo IMEP, como mostra a Figura 5.19. As barras vermelhas representam o valor da simulação numérica, as barras azuis, os valores dos dados experimentais, e o ponto preto, a diferença percentual relativa entre eles. Com o aumento da concentração de etanol no combustível, verifica-se que houve um aumento da diferença percentual entre os resultados numéricos e os dados experimentais, sendo essa diferença máxima de 13,54%.

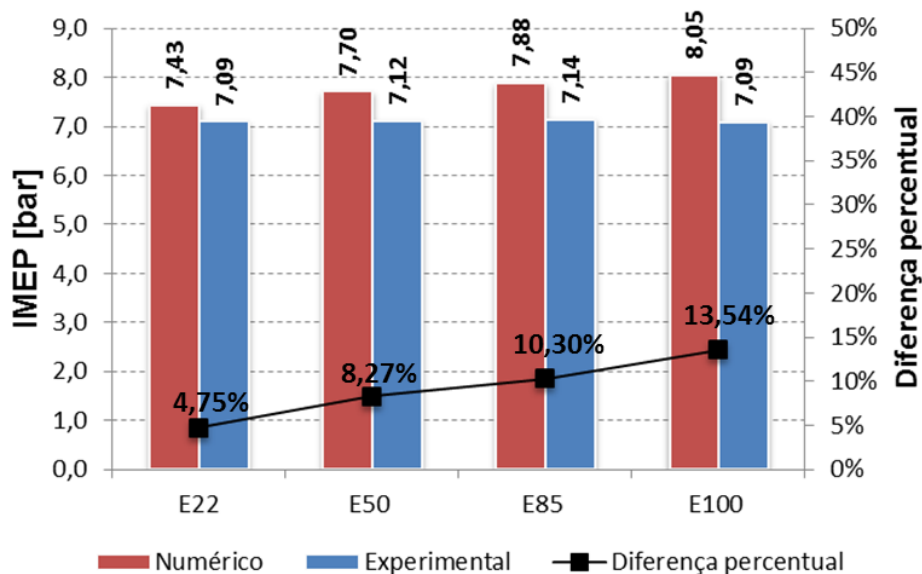


Figura 5.19 - IMEP numérico 3D e experimental para os 4 casos. Fonte: Autor

Em contrapartida, quando se analisa a pressão máxima no cilindro, tem-se um comportamento contrário do IMEP, como mostra Figura 5.20. Para o E22, a diferença percentual entre o numérico e o experimental foi de 11,03% e, em todos os outros casos, tem-se uma diferença inferior a 3%.

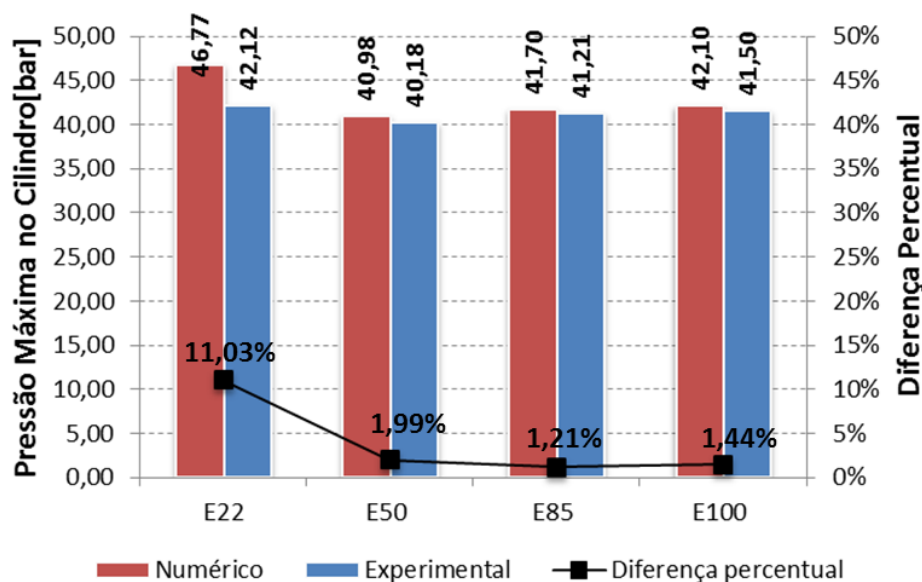


Figura 5.20 - Pressão máxima no cilindro numérico 3D e experimental para os 4 casos. Fonte: Autor

Entretanto, para o ângulo de pressão máxima no cilindro ocorre o aumento progressivo dessa diferença percentual com o aumento da concentração de etanol, como mostra a Figura 5.21. Com um ligeiro adiantamento para o E22, com uma diferença de 0,81% e um aumento desse atraso para os outros casos, chegando ao máximo de 19,89% para o E100.

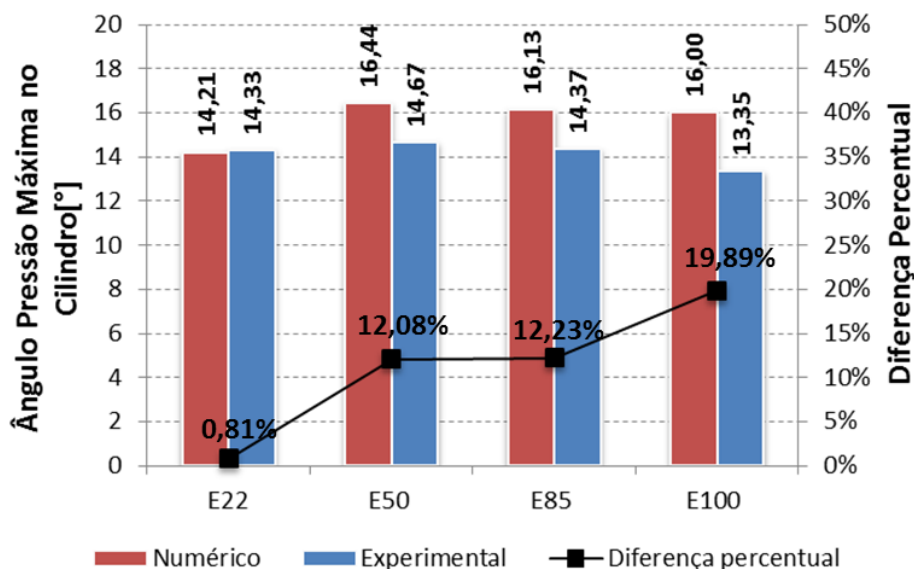


Figura 5.21 - Ângulo de pressão máxima no cilindro numérico 3D e experimental para os 4 casos. Fonte: Autor

Podendo até o momento inferir que o mecanismo cinético químico desenvolvido por Cota (COTA, 2018) de 75 espécies, em valores absolutos, reproduz melhor a pressão máxima no cilindro para concentrações acima de 50% de etanol, com erros inferiores a 3%. Em contrapartida, ocorre um deslocamento progressivo do ângulo de pressão máxima, amplificando a diferença em relação aos dados experimentais com o aumento da concentração de etanol. Essa tendência pode ainda ser confirmada pelo aumento da diferença do IMEP.

Em relação ao processo de combustão, pode-se comparar os MBF. Da mesma forma que o ângulo de pressão máxima se desloca com o aumento da presença de etanol, temos a reprodução desse comportamento no MBF 50, porém de maneira mais intensa, chegando a uma diferença máxima de 43,08%, como mostra a Figura 5.22. Assim, o centro da combustão tem um grande deslocamento com o aumento da

porcentagem de etanol, sendo que o E22 apresenta a menor diferença percentual de 7,41% e as composições intermediárias, E50 e E85, em torno de 30%.

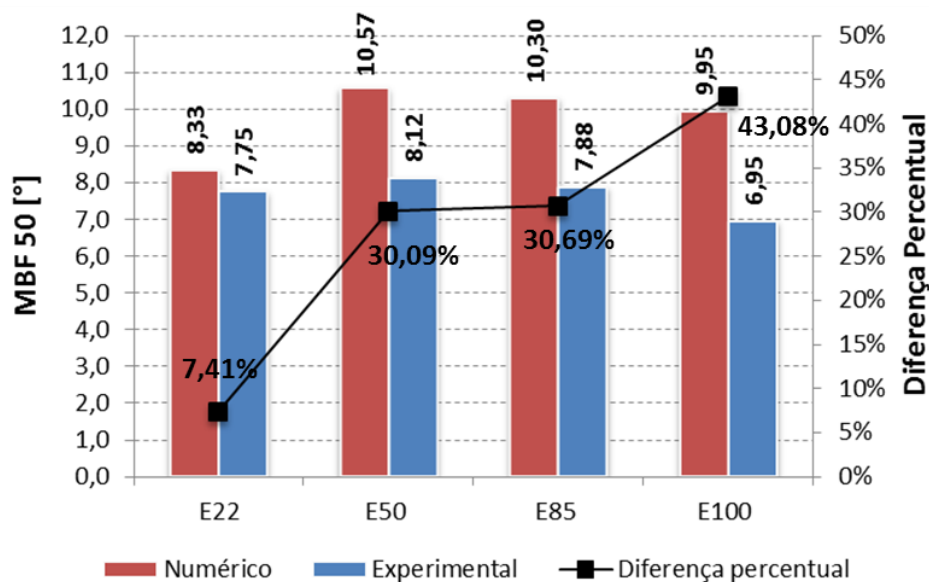


Figura 5.22 - MBF 50 numérico 3D e experimental para os 4 casos. Fonte: Autor

Para analisar a velocidade do processo de combustão, pode-se avaliar o parâmetro MBF 10-90, mostrado na Figura 5.23. Em todos os casos simulados, ocorreu uma desaceleração da combustão em relação ao experimental, porém não apresentou uma tendência contínua. O E22 tem uma diferença de 10,42% em relação aos dados experimentais, sendo essa diferença intensificada no E50 para 21,60%. Entretanto, com o aumento da presença de etanol, essa diferença abrandou, como pode ser visto no E85 (19,67%) e E100 (14,78%).

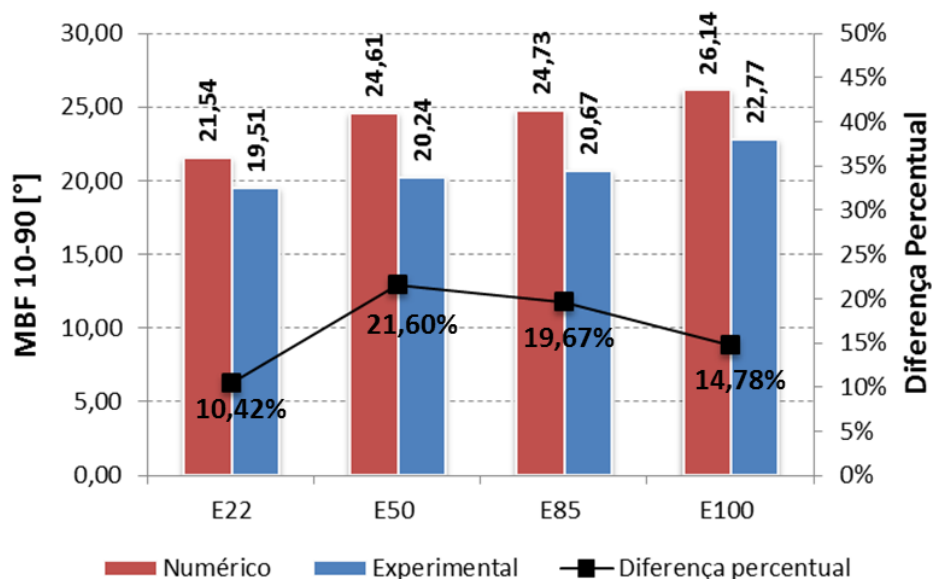


Figura 5.23 - MBF 10-90 numérico 3D e experimental para os 4 casos. Fonte: Autor

Analisando o centróide da combustão pelos parâmetros MBF 10-50 e MBF50-90, como mostra a Figura 5.24 e a Figura 5.25. A primeira metade da combustão apresentou um comportamento constante em todos os casos simulados com uma diferença média de 15,55% em relação aos dados experimentais. Em contrapartida, para a segunda metade da combustão, tem-se uma diferença de 5,91% para o E22. Essa diferença aumenta no E50, chegando a 26,75%, sendo que, para os outros dois combustíveis, ela diminui com o aumento da concentração de etanol, chegando ao mínimo de 14,75% para o E100. Cabe ainda ressaltar que mesmo o E22 apresentando a menor diferença no MBF 50-90, seu comportamento não é coerente com a realidade, como mostra a Figura 5.12. Tendo ele, um aumento da intensidade da taxa de queima, seguido de uma queda brusca.

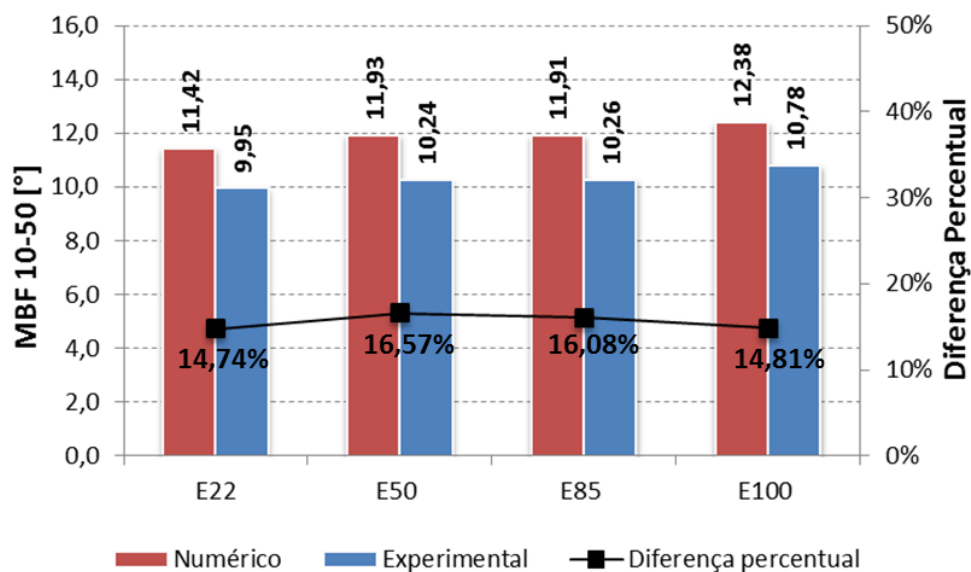


Figura 5.24 - MBF 10-50 numérico 3D e experimental para os 4 casos. Fonte: Autor

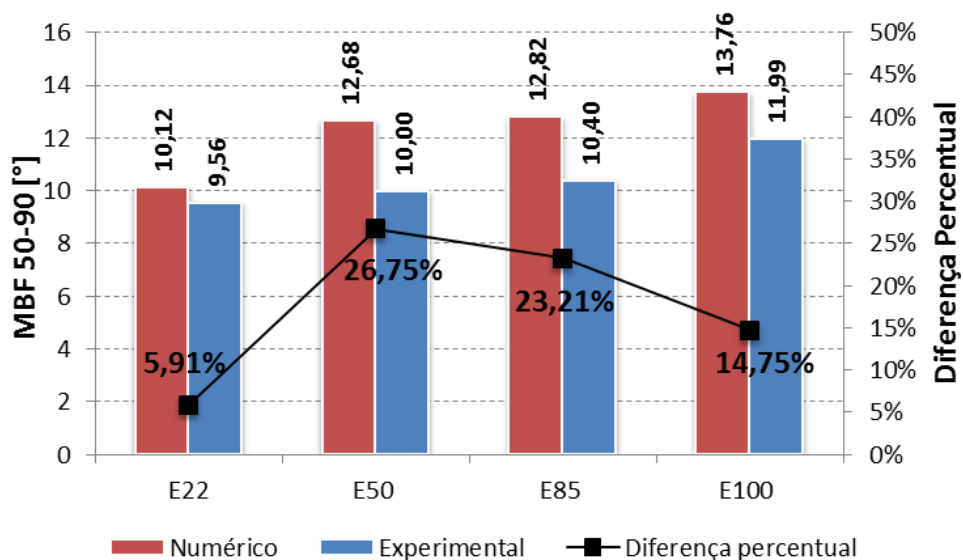


Figura 5.25 - MBF 50-90 numérico 3D e experimental para os 4 casos. Fonte: Autor

Por último, pode-se analisar as eficiências de conversão de combustível e a eficiência de combustão. A Figura 5.26 e a Figura 5.27 apresentam comportamentos antagônicos, sendo a diferença percentual analisada em relação aos dados do GT-Power. A eficiência de conversão de combustível cresce com o aumento do volume de

etanol e a eficiência de combustão diminui com o aumento do volume de etanol. Vale a pena ressaltar que em todos os casos as diferenças percentuais para a eficiência de combustão foram menores de 5%.

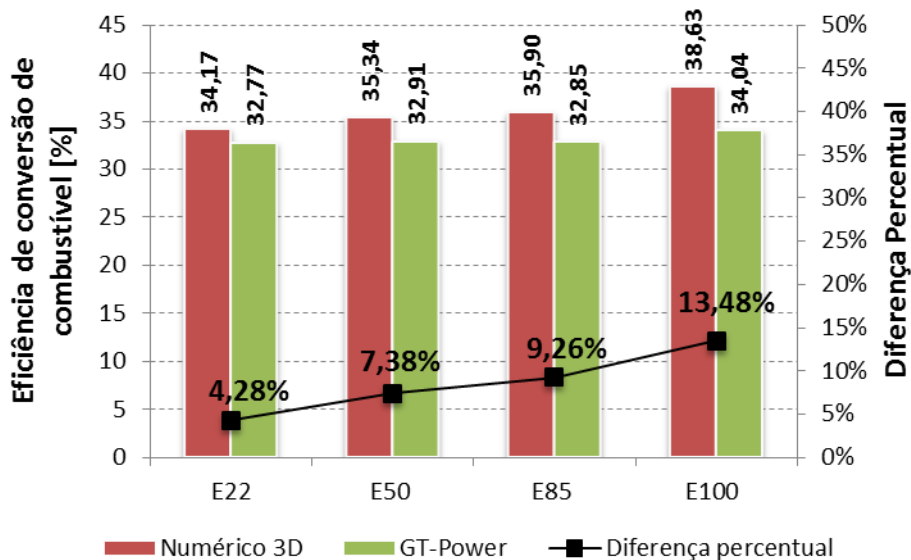


Figura 5.26 - Eficiência de conversão de combustível numérico 3D e do GT-Power para os 4 casos. Fonte: Autor

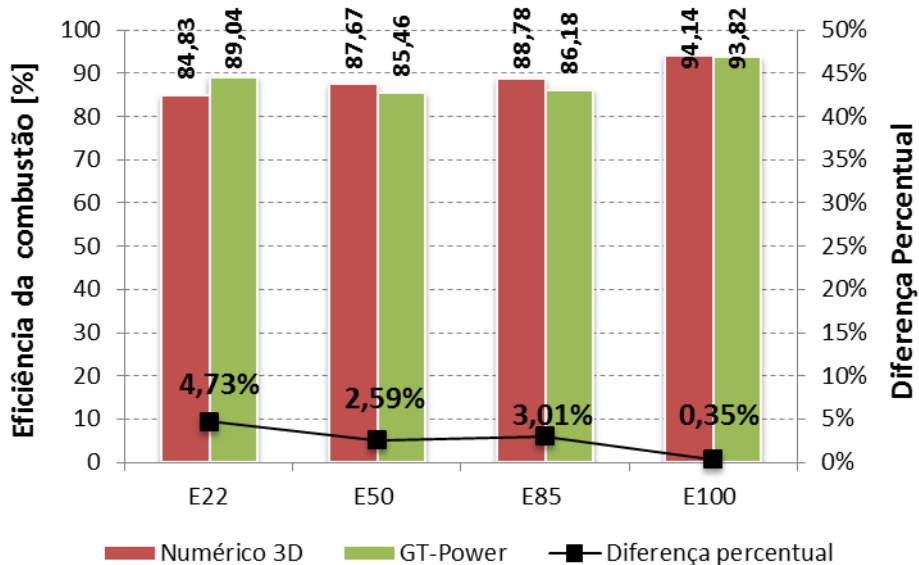


Figura 5.27 - Eficiência da combustão numérico 3D e do GT-Power para os 4 casos. Fonte: Autor

Dessa segunda etapa, pode-se sintetizar os resultados na Figura 5.28. Para os parâmetros IMEP, ângulo de pressão máxima, MBF 50 e eficiência de conversão de combustível, têm-se maiores diferenças percentuais em relação aos dados experimentais e do GT-Power com o aumento do volume de etanol presente no combustível. Para a pressão máxima no cilindro, MBF 10-90, MBF 10-50 e MBF 50-90, verificamos que, a partir do E50, com o aumento do volume de etanol, as diferenças percentuais tendem a diminuir.

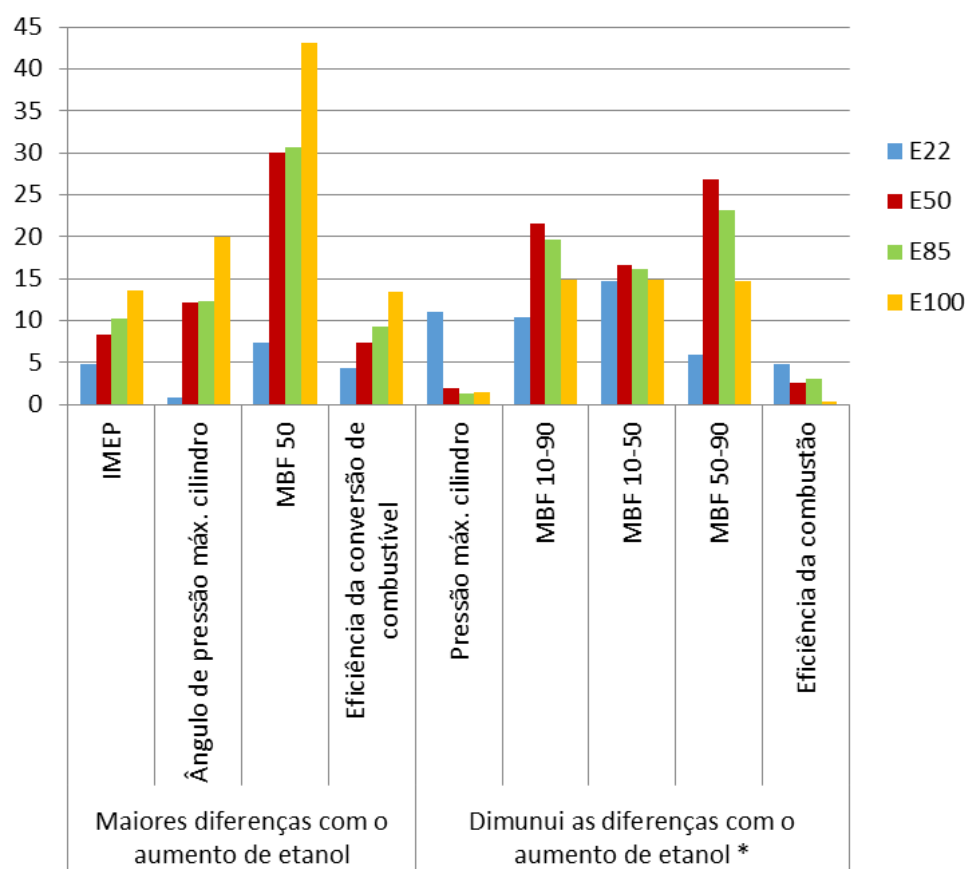


Figura 5.28 - Comparação das diferenças percentuais de cada mecanismo em relação aos dados experimentais e dados do GT-Power. Fonte: Autor

Entretanto, vale a pena destacar que, apesar do mecanismo de Cota (75 espécies) apresentar no geral menores diferenças percentuais nos parâmetros analisados, em relação à taxa de liberação de calor, ele apresenta um comportamento diferente do esperado para o E22. Além de apresentar um valor mais elevado para a máxima pressão no cilindro. Já para as curvas do E50 ao E100 tem-se uma taxa de liberação de calor coerente com o esperado. Porém, verifica-se que à medida que aumenta a presença de

etanol, tem-se o atraso no ângulo de pressão máxima, chegando a diferenças de até 20%, mesmo que as diferenças de pressão máxima fiquem menores que 2% para esses casos.

5.3 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os resultados apresentados nesta seção salientam as dificuldades em atingir um mecanismo cinético reduzido que seja coerente para todos os parâmetros em simulações tridimensionais. Mostram também que o mecanismo de Cota de 75 espécies apresenta resultados promissores, melhores até que o mecanismo da literatura em alguns aspectos. Adicionalmente, a análise do seu comportamento em relação a diferentes composições da mistura de gasolina e etanol ressaltam ainda a necessidade de alguns ajustes.

6 CONCLUSÕES

A metodologia proposta para a realização deste trabalho de pesquisa mostrou-se adequada, destacando principalmente o uso de simulações unidimensionais para a geração de condições de contorno para as simulações tridimensionais. Cabe ainda ressaltar a sua utilização como alternativa em caso de falha de algum dos sensores experimentais.

As simulações unidimensionais e tridimensionais se complementam, como para o caso do cálculo do coeficiente de descarga das válvulas, parâmetro essencial para as simulações unidimensionais no GT-Power, calculado por simulações tridimensionais. Por sua vez, as simulações no GT-Power possibilitam uma inicialização mais precisa das simulações tridimensionais no Converge CFD, como, por exemplo, a verificação do pequeno adiantamento da válvula de exaustão, atraso esse inerente e dentro do desvio padrão das medidas experimentais. Como também a maior discretização dos dados de entrada, melhorando a convergência das simulações tridimensionais.

Além disso, foi necessário um estudo separado da formação do *spray* para os ajustes das constantes da quebra secundária das gotas de combustível. Sendo ajustado a constante B_1 do modelo KH para o valor de 7 e a constante C_3 do modelo RT para o valor de 0,5. Esse ajuste foi realizado comparando os resultados experimentais obtidos por shadowgrafia.

Após todos esses ajustes, foi possível realizar simulações tridimensionais para a análise dos mecanismos cinéticos químicos reduzidos desenvolvidos por Cota. O mecanismo de 115 espécies apresentou uma baixa velocidade de queima, tendo diferenças percentuais em relação aos dados experimentais de até 236%. Esse mecanismo ainda precisa de ajustes em relação aos expoentes da equação de Arrhenius que estão diretamente ligados nas velocidades das reações químicas. Talvez seja ainda necessário a avaliação de sensibilidades das reações elementares presentes nele.

Em relação ao mecanismo de Cota com 75 espécies, ele apresentou um comportamento semelhante ao mecanismo da literatura de Abianeh para as curvas de pressão e taxa de liberação de calor. Os dois mecanismos superestimaram a pressão máxima no cilindro para o combustível E10 na condição de operação 1. Suas taxas de liberação de calor se afastam um pouco do comportamento esperado pela presença de

uma elevação brusca da taxa seguida por uma queda da mesma. Os dois mecanismos também tiveram tempos de simulação próximos, sendo 90,45 horas por ciclo do motor simulado com o mecanismo de Abianeh e 91,85 horas para o mecanismo de Cota com 75 espécies.

Para os parâmetros globais de IMEP, pressão máxima no cilindro, ângulo de pressão máxima no cilindro, MBF 10-90, MBF 50-90 e as eficiências de conversão de combustível e de combustão, o mecanismo de Cota com 75 espécies apresentou um melhor desempenho que o mecanismo de Abianeh nas mesmas condições. Entretanto, é ainda necessário no mecanismo de Cota com 75 espécies alguns ajustes em relação às velocidades de queima, pois a primeira metade da combustão (MBF 10-50) ocorre mais lenta do que o esperado e a segunda metade (50-90), mais acelerada, mascarando a análise pelo MBF 10-90, que apresentou uma diferença inferior a 5% em relação aos dados experimentais

Em complemento, é avaliado o mecanismo de Cota com 75 espécies para quatro composições de combustíveis, E22, E50, E85 e E100, na mesma condição de operação e carga. Verifica-se que o E22 reproduz o mesmo comportamento da simulação com o E10 para a pressão do cilindro e taxa de liberação de calor, porém com menor intensidade. A partir de volumes de etanol superiores a 50%, esse comportamento não é mais verificado. Com o aumento de etanol, verifica-se também um atraso no ângulo de pressão máximo, chegando a diferenças de até 20%, mesmo que as diferenças de pressão máxima fiquem menores que 2% para esses casos.

Para parâmetros globais, ainda em relação aos combustíveis, E22, E50, E85 e E100, pode-se avaliar o comportamento do mecanismo de Cota com 75 espécies em dois grupos. No primeiro grupo, temos que as diferenças aumentam em relação aos dados experimentais e do GT-Power, com o aumento do volume de etanol presente no combustível, sendo elas: o IMEP, o ângulo de pressão máxima, o MBF 50 e a eficiência de conversão de combustível.

No segundo grupo, verifica-se que as diferenças percentuais para a pressão máxima no cilindro, o MBF 10-90, o MBF 10-50 e o MBF 50-90, diminuem com o aumento do volume de etanol, porém, para concentrações superiores e iguais a 50% de etanol no combustível.

6.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

A partir dos resultados obtidos neste trabalho e de sua análise, torna-se possível sugerir os seguintes tópicos para trabalhos futuros:

- Realizar testes de bancada para a injeção de combustível e assim analisar de forma mais completa a formação do spray em relação a outros parâmetros, como a penetração de combustível e o diâmetro médio das gotas formadas.
- Verificar a possibilidade de algum ajuste no mecanismo cinético químico de Cota com 115 espécies, que não teve um bom comportamento nas simulações realizadas.
- Realizar um ajuste no mecanismo cinético químico de Cota com 75 espécies, a fim de diminuir as diferenças encontradas.
- Nos próximos mecanismos cinéticos químicos avaliados, recomenda-se primeiro a análise do seu comportamento em condições de carga homogênea, de preferência em um motor PFI, antes da sua análise em condições de carga estratificada.
- Avaliar o comportamento do mecanismo cinético químico em presença de EGR.
- Avaliar o comportamento do mecanismo cinético químico em diferentes misturas de gasolina e etanol, como também em diferentes condições de rotações e carga.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abianeh, O. S., Oehlschlaeger, M. A. e Sung, C. L. 2015.** A Surrogate Mixture and Kinetic Mechanism for Emulating the Evaporation and Autoignition Characteristics of Gasoline. *Combustion and Flame Journal*. 162, 2015, Vol. 10, pp. 3773-3784.
- Andrae, J. C. G. . 2013.** Comprehensive chemical kinetic modeling of toluene reference fuels oxidation. 2013, Vol. 107, pp. 740-748.
- Andrae, J. C. G. 2008.** Development of a detailed kinetic model for gasoline surrogate fuels. *Fuels*. 2008, Vol. 87, pp. 2013-2022.
- ANP. 2017.** *Anuário estatístico brasileiro do petróleo, gás natural e biocombustíveis*. s.l. : AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCMBUSTÍVEIS, 2017.
- . **2018.** *Petróleo e derivados. Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis*. [Online] 2018. <http://www.anp.gov.br/petroleo-derivados/1004-petroleo>.
- ASTM. 2009.** *Standard test method for motor octane number of spark-ignition engine fuel - ASTM D2700*. West Conshohocken : American Society for Testing and Materials,, 2009.
- . **1999.** *Standard test method for Research Octane Number of spark-ignition - ASTM-D2699*. Washington : American Society for Testing and Materials,, 1999.
- Awada, Omar I. , et al. 2018.** Alcohol and ether as alternative fuels in spark ignition engine: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2018, Vol. 82, pp. 2586 - 2605.
- Baeta, Jose Guilherme Coelho. 2006.** *Metodologia experimental para a maximização do desempenho de um motor multicom bustível turboalimentado sem prejuízo à eficiência energética global*. Belo Horizonte : Universidade Federal de Minas Gerais, 2006. (Tese de doutorado).
- Basso, Luiz C. , et al. 2008.** Yeast selection for fuel ethanol production in Brazil. *Federation of European Microbiological Societies*. 2008, Vol. 8, pp. 1155-1163.
- Battistoni, M., et al. 2015.** Combustion CFD modeling of a spark ignited optical access engine fueled with gasoline and ethanol. *Energy Procedia*. 2015, Vol. 82, pp. 424-431.
- Baumgarten, Carsten. 2006.** *Mixture formation in Internal Combustion Engines*. s.l. : Springer, 2006.
- Bayraktar, Hakan . 2005.** Experimental and theoretical investigation of using gasoline–ethanol blends in spark-ignition engines. *Renewable Energy*. 2005, Vol. 30, pp. 1733 - 1747.

Bosh, Robert. 2005. *Manual de Tecnologia Automotiva*. São Paulo : Edgard Blücher, 2005.

Bounaceur , R., et al. 2009. Detailed kinetic models for the low-temperature auto-ignition of gasoline surrogates. 2009.

BP Energy Outlook . 2017. BP Energy Outlook - 2017 edition. [Online] 2017. <http://www.bp.com/content/dam/bp/pdf/energy-economics/energy-outlook-2017/bp-energy-outlook-2017.pdf>.

BP Statistical Review. 2016. BP Statistical Review of World Energy - June 2016. [Online] 2016. <http://www.bp.com/content/dam/bp/pdf/energy-economics/statistical-review-2016/bp-statistical-review-of-world-energy-2016-full-report.pdf>.

Braga, R. M. 2018. *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 simulação CFD 3D*. Belo Horizonte : Universidade Federal de Minas Gerais, 2018. Dissertação de mestrado.

Braga, R. M., et al. 2017. 3D Numerical Characterization of a Multi-Holes Injector in a Quiescent Vessel and its Application in a Single-Cylinder Research Engine Using Ethanol. *SAE International*. 2017.

Brunetti, Franco. 2012. *Motores de Combustão Interna - Volume I*. São Paulo : Blucher, 2012.

Cai, L. e Pitsch, H. 2015. Optimized chemical mechanism for combustion of gasoline surrogate fuels. *Combustion and Flame*. 2015, Vol. 162, pp. 1623-1637.

Cancino, L. R. , et al. 2010. Measurement and Chemical Kinetics Modeling of Shock-Induced Ignition of Ethanol-Air Mixtures. 2010, Vol. 24, pp. 2830-2840.

Cancino, L. R., et al. 2009. Autoignition of gasoline surrogate mixtures at intermediate temperatures and high pressures: Experimental and numerical approaches. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2009, Vol. 32, pp. 501-508.

Cancino, Leonel Rincón. 2009. *Desenvolvimento e Aplicação de Modelos Cinéticos Detalhados para Etanol e Combustíveis Hidrocarbonetos Contendo Etanol*. Florianópolis : Universidade Federal de Santa Catarina, 2009. Tese de doutorado.

Cancino, Leonel Rincón . 2004. *Análise de equilíbrio, cinética química da ignição térmica e propagação de chama plana laminar de misturas de hidrocarbonetos leves com ar*. Florianópolis : Universidade Federal de Santa Catarina, 2004. Dissertação de mestrado.

Cavadini, Matteo. 2014. *1-D Simulations of EGR on a Marine Diesel Engine using GT-Power*. Zurich : Aerothermochemistry and Combustion Systems Laboratory Swiss Federal Institute of Technology (ETH), 2014. Dissertação de mestrado.

Çelik, Mustafa Bahattin e Özdalyan, Bülent. 2010. Gasoline direct injection. www.intechopen.com. [Online] 2010.

- Çengel, Yunus A. e Boles, Michael A. 2004.** *Thermodynamics - An Engineering Approach*. s.l. : McGraw-Hill Science, 2004.
- Chaos, M., et al. 2007.** A high-temperature chemical kinetic model for primary reference fuels. 2007, Vol. 39, 7, pp. 399-414.
- Chaos, M., et al. 2007.** A PRF+Toluene Surrogate Fuel Model for Simulating Gasoline Kinetics. *5th US Combustion Meeting*. 2007.
- CONVERGE CFD SOFTWARE. 2017.** *ConvergeCFD Manual Series: Converge Manual v2.4*. 2017.
- Costa, Rodrigo C. e Sodr e, Jos e R. . 2010.** Hydrous ethanol vs. gasoline-ethanol blend: Engine performance and emissions. *Fuel*. 2010, Vol. 89, pp. 287-293.
- Cota, Filipe Silva. 2018.** *Desenvolvimento de mecanismos cineticos qu micos reduzidos para blends de gasolina e etanol*. Belo Horizonte : Universidade Federal de Minas Gerais, 2018. (Disserta o de mestrado).
- da Silva, Ros ngela. 2008.** *Efeito dos combust veis oxigenados no rendimento termodin mico e tratamento catal tico des emiss es em motores ciclo otto operando na regi o de queima pobre*. Porto Alegre : Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2008. Tese de doutorado.
- Dallmann, Tim e Fa anha, Cristiano. 2017.** *International comparison of Brazilian regulatory standards for light-duty vehicle emissions*. Washington : International Council on Clean Transportation, 2017.
- de Souza Dias, Marina Oliveira, et al. 2015.** Sugar cane processing for ethanol and sugar in Brazil. *Environmental Development*. 2015, Vol. 15, pp. 35-51.
- de Souza, Gilmar Laigner, Bracarense, Alexandre Queiroz e Massarani, Marcelo . 2016.** Resid ncia Tecnol gica para Engenheiros. *Simp sio Internacional de Engenharia Automotiva - SIMEA 2016*. 2016.
- Duyar, Serkan. 2014.** *Modeling diesel combustion in heavy duty engine using detailed chemistry approach and CFD*. Stockholm : KTH School of Industrial Engineering and Management, 2014. Disserta o de mestrado.
- Ferguson, Colin R. e Kirkpatrick, Allan T. 2016.** *Internal Combustion Engines - Applied Thermosciences*. s.l. : John Wiley & Sons, Ltd, 2016. Third edition.
- Ferrari, Giancarlo. 2000.** *Motori a Combustione INTERNA*. Torino : Edizione il capitello , 2000.
- Frassoldati, A., et al. 2010.** Kinect modeling of the oxidation of ethanol and gasoline surrogate mixtures. *Combustion Science and Technolofy*. 2010, Vol. 182, pp. 653-667.
- Gama Technologies. 2016.** *GT-SUITE - Flow Theory Manual*. 2016.
- , 2016. *GT-SUITE Engine Performance*. Westmont : s.n., 2016.
- Ganesan, V. 1994.** *Internal Combustion Engines*. s.l. : McGraw-Hill, 1994.

Gervasio, Daniel Texeira. 2017. *Metodologia de correlação e análise de modelos fluidodinâmicos 1D para motores de combustão interna*. Recife : Universidade Federal de Pernambuco, 2017. Dissertação de mestrado.

Giacosa, Dante. 1970. *Motores Endotermicos*. 3º Edição. s.l. : Hoepli, 1970.

Guia a história: carros. 2016. *Guia a história: carros*. São Paulo : On Line Editora, On Line Editora, 2016.

Heywood, John. 1988. *Internal combustion engine fundamentals*. s.l. : McGraw-Hill Education, 1988.

Hindi, G. Q. 2011. *3D numerical investigation of mixture formation and combustion in a DISI engine at part-load under stratificated operation*. São José dos Campos : Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 2011.

Huang, Chen. 2014. *Numerical Modelling of Fuel Injection and Stratified Turbulent Combustion in a Direct-Injection Spark-Ignition Engine Using an Open Source Code*. Göteborg : Chalmers University of Technology, 2014. Tese de doutorado.

IEA. 2016. *CO2 emissions from fuel combustion - Highlights*. France : International Energy Agency, 2016.

Inovar-auto. 2015. Sistema de Acompanhamento do Inovar-Auto. [Online] 2015. http://inovarauto.mdic.gov.br/InovarAuto/public/inovar.jspx?_adf.ctrl-state=5xv7wn7gx_4.

Lago Sari, R. 2017. Avaliação da utilização de etanol com elevados teores de água em motores de combustão interna com ignição por centelha. 2017. Dissertação de mestrado.

Lanzanova, T. D. M. 2013. *Avaliação numérica e experimental do desempenho de um motor otto operando com etanol hidratado*. Porto Alegre : Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2013. Dissertação de mestrado.

Lawrence Livermore National Laboratory. 2002. Primary Reference Fuels (PRF): iso-Octane / n-Heptane Mixtures. [Online] 2002. <https://combustion.llnl.gov/archived-mechanisms/surrogates/prf-isooctane-n-heptane-mixture>.

Leplat, N. , et al. 2010. Numerical and experimental study of ethanol combustion and oxidation in laminar premixed flames and in jet-stirred reactor. 2010, 158, pp. 705-725.

Li, Hua , et al. 2016. Autoignition of ternary blends for gasoline surrogate at wide temperature ranges and at elevated pressure: Shock tube measurements and detailed kinetic modeling. 2016, Vol. 181, pp. 916-925.

Li, J., et al. 2007. Chemical Kinetics of Ethanol Oxidation. *5th US Combustion Meeting*. 2007.

Lopes, Mario Lucio, et al. 2016. Ethanol production in Brazil: a bridge between science and industry. *Brazilian Journal of Microbiology*. 2016, Vol. 47S, pp. 64-76.

- Luz, Elaine Rocha da. 2003.** *Predição de propriedades de gasolinas usando espectroscopia FTIR e regressão por mínimos quadrados parciais.* Rio de Janeiro : Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2003. (Dissertação de Mestrado).
- Machado, Guilherme Bastos. 2012.** *Metodologias para Desenvolvimento de Combustíveis e Determinação da Velocidade de Propagação de Chama em Motores de Ignição por Centelha.* Rio de Janeiro, : Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro,, 2012. Tese de doutorado.
- Maghbouli, A., et al. 2013.** An advanced combustion model coupled with detailed chemical reaction mechanism for D.I diesel engine simulation. *Applied Energy.* 2013, Vol. 111, pp. 758-770.
- Marinov, N. M. 1999.** A Detailed Chemical Kinetic Model for High Temperature Ethanol Oxidation. 1999, Vol. 31, 3, pp. 183-220.
- Marques Ribeiro, Jean Helder. 2014.** *Análise numérica da turbulência no escoamento de ar em motor monocilíndrico.* Belo Horizonte : Universidade Federal de Minas Gerais, 2014.
- Martins, C. M. 2018.** *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 : Universidade Federal de Minas Gerais, 2018. Dissertação de mestrado.
- Massom Kumar, V. V. 2015.** *Predictive Diesel Combustion Using DI-Pulse in GT-Power.* Göteborg, Sweden : Chalmers University of Technology, 2015. Dissertação de mestrado.
- Masum, B M, et al. 2013.** Effect of ethanol–gasoline blend on NO_x emission in SI engine. *Renewable and Sustainable Energy Reviews.* 2013, Vol. 24, pp. 209-222.
- Maurya, R. K. e Akhil, N. 2016.** Numerical investigation of ethanol fuelled HCCI engine using stochastic reactor model. Part 1: Development of a new reduced ethanol oxidation mechanism. *Energy Conversion and Management.* 2016, Vol. 118, pp. 44-54.
- . **2016.** Numerical investigation of ethanol fuelled HCCI engine using stochastic reactor model. Part 2: Parametric study of performance and emissions characteristics using new reduced ethanol oxidation mechanism. *Energy Conversion and Management.* 2016, Vol. 121, pp. 55-70.
- Mehl, M., et al. 2011.** An Approach for Formulating Surrogates for Gasoline with Application toward a Reduced Surrogate Mechanism for CFD Engine Modeling. *Energy Fuels.* 2011, Vol. 25, 11, pp. 5215-5223.
- Melo, André de Souza e Barreto Sampaio, Yony de Sá. 2014.** Impacto dos preços da gasolina e do etanol sobre a demanda de etanol no Brasil. *Revista de Economia Contemporânea.* 2014, Vol. 18, 1.
- Meneguetti, Claudio Cezar , Mezaroba, Silvana e Machado Groff, Andréa . 2010.** *Processos de produção do álcool etílico de cana-de-açúcar e os possíveis*

reaproveitamentos dos resíduos resultantes do sistema. Campo Mourão : IV Encontro de Engenharia de Produção Agroindustrial, 2010.

Merker, Günter P., Schwarz, Christian e Teichmann, Rüdiger. 2009. *Combustion Engines Development: Mixture Formation, Combustion, Emissions and Simulation.* s.l. : Springer, 2009.

Metcalf, Wayne K., et al. 2007. The development of a detailed chemical kinetic mechanism for diisobutylene and comparison to shock tube ignition times. *Proceedings of the Combustion Institute.* 2007, Vol. 31, 1, pp. 377-384.

Miller, Josh, Du, Li e Kodjak, Drew. 2017. *Impacts of world-class vehicle efficiency and emissions regulations in select G20 countries.* Washington DC : International Council on Clean Transportation, 2017.

Miller, Joshua D e Façanha, Cristiano. 2014. *The state of clean transport policy - A 2014 synthesis of vehicle and fuel policy developments.* Washington DC : International Council on Clean Transportation, 2014.

Mittal, G. , et al. 2014. Autoignition of ethanol in a rapid compression machine. 2014, Vol. 161, 5, pp. 1164-1171.

Norton, T. S. e Dryer, F. L. 1992. An experimental and modeling study of ethanol oxidation kinetics in an atmospheric pressure flow reactor. *International Journal of Chemical Kinetics.* 1992, Vol. 24, pp. 319 - 344.

OECD e IEA. 2017. *International Comparison of Light-Duty Vehicle fuel economy: Ten years of fuel economy benchmarking.* s.l. : International Energy Agency, 2017.

ONU News. 2017. ONU News. [Online] 2017.
<https://news.un.org/pt/story/2017/06/1589091-populacao-mundial-atingiu-76-bilhoes-de-habitantes>.

Ozdor, Nir, Dulger, Mark e Sher, Eran . 1994. Cyclic variability in spark ignition engines - A literature survey. *SAE Technical Paper Series.* 1994.

Pacheco, Augusto Finger. 2016. *Analysis and reduction of detailed chemical kinetic mechanisms for combustion of ethanol and air.* Florianópolis : Universidade Federal de Santa Catarina, 2016. Dissertação de mestrado.

Posada, Francisco, Miller, Joshua e Façanha, Cristiano. 2017. *Technology Uptake, Costs, and Benefits Under a Next-Phase Passenger Car Efficiency Program in Brazil.* Washington, DC : International Council on Clean Transportation, 2017.

Pousada, Francisco e Façanha, Cristiano. 2015. *Brazil passenger vehicle market statistics: international comparative assessment of technology adoption and energy consumption.* Washington : International Council on Clean Transportation, 2015.

Pujatti, Fabricio Jose Pacheco. 2007. *Desenvolvimento de um sistema de gerenciamento eletrônico para motores de ignição por centelha.* Belo Horizonte : Universidade Federal de Minas Gerais, 2007. Tese de doutorado.

- Pulkrabek, Willard W. 1997.** *Engineering Fundamentals of the Internal Combustion Engine*. New Jersey : Prentice Hall, 1997.
- Ra, Youngchul e Reitz, Rolf D. . 2008.** A reduced chemical kinetic model for IC engine combustion simulations with primary reference fuels. *Combustion and Flame*. 2008, Vol. 155, pp. 713-738.
- Ra, Youngchul e Reitz, Rolf D. 2011.** A combustion model for IC engine combustion simulations with multi-component fuels. *Combustion and Flame*. 2011, Vol. 158, pp. 69-90.
- Rech, Charles. 2010.** *Análise numérica e experimental do escoamento em motores de combustão interna*. Porto Alegre : Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2010. (Tese de doutorado).
- Reis, L. M., et al. 2016.** Methodology for Numerical Simulations of a Multi - Hole Injector with Experimental Validation. *Congresso Internacional de Motores, Combustíveis e Combustão – CIMCCO*. 2016.
- REN21. 2016.** *Renewables 2016: Global status report*. France : REN21 (Renewable Energy Policy Network for the 21st Century), 2016.
- Rodrigues Filho, Fernando Antonio. 2014.** *Projeto, construção e caracterização do desempenho de um motor de combustão interna provido de um sistema de ignição por lança chamas de carga estratificada*. Belo Horizonte : Universidade Federal de Minas Gerais, 2014. Tese de doutorado.
- Röhl, O e Peters, N. 2009.** A Reduced Mechanism for Ethanol Oxidation. 2009.
- Sarathy, S. M., Farooq, Aamir e Kalghatgi, Gautam T. 2018.** Recent progress in gasoline surrogate fuels. *Progress in Energy and Combustion Science*. 2018, Vol. 65, pp. 67-108.
- Saxena, Priyank e Williams, Forman A. . 2007.** Numerical and experimental studies of ethanol. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2007, Vol. 31, pp. 1149-1156.
- Sodja, J. 2007.** *Turbulence Models in CFD*. s.l. : Department of Physics, University of Ljubljana, 2007.
- Solid, S. N., et al. 2015.** Simulation Studies on the Performance of Small Engine Fuelled by Methane and the Effect of. *eIndian Journal of Science and Technology*,. 2015, Vol. 8, 30.
- Spadaccini, L. J. e Chimitz, W. 1972.** An Investigation of Nonequilibrium Effects in an Internal Combustion Engine. *Journal of Engineering for Power - ASME*. 1972, Vol. 94, 2, pp. 98-107.
- Stone, Richard. 1999.** *Introduction to Internal Combustion Engines*. Third edition. s.l. : Macmillan Press LTD, 1999.
- Tilmann, C. A. 2013.** *Motores de combustão interna e seus sistemas*. s.l. : Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Sul-rio-grandense, 2013.

Togbé, C., Ahmed, A. M. e Dagaut, P. 2009. Experimental and Modeling Study of the Kinetics of Oxidation of Ethanol–Gasoline Surrogate Mixtures (E85 Surrogate) in a Jet-Stirred Reactor. 2009, Vol. 22, 5, pp. 1936-1941.

Turns, S. R. 2013. *Introdução a combustão: Conceitos e aplicações*. s.l. : McGrawHill Education, 2013.

United Nations. 1998. Kyoto protocol to the united nations framework convention on climate change. [Online] 1998. <http://unfccc.int/resource/docs/convkp/kpeng.pdf>.

van Basshuysen, Richard e Schäfer, Fred . 2004. *Internal combustion engine handbook: basics, components, systems, and perspectives*. Warrendale : SAE International, 2004.

Varella, C. A. A. 2010. *Constituição dos motores – Notas de aula*. s.l. : Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, 2010.

Versteeg, H. K. e Malalasekera, W. 2007. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The finite volume method*. Second Edition. s.l. : Pearson Education Limited, 2007.

VI Escola de Combustão. 2017. *Curso de modelagem de combustão de biocombustíveis*. Foz do Iguaçu : s.n., 2017. (Notas de aula).

Vieira da Silva, Thiago Rodrigo. 2017. *Estudo de estratégias de controle dos processos internos de um motor de combustão interna de injeção direta de etanol turbo-alimentado para maximização da eficiência global*. Belo Horizonte : Universidade Federal de Minas Gerais, 2017. Dissertação de mestrado.

Wang, Z., et al. 2012. A computational investigation of diesel and biodiesel combustion and NOx formation in a light-duty compression ignition engine. *Spring Technical Meeting of the Central States Section of the Combustion Institute*. 2012.

Way, R. J. B. 1976. Methods for determination of composition and thermodynamic properties of combustion products for internal combustion engine calculations. *Combustion Engines Group*. 1976, Vol. 190.

Zhao, F., Lai, M.-C. e Harrington, D. L. 1999. Automotive spark-ignited direct-injection gasoline engines. *Progress in Energy and Combustion Science*. 1999, Vol. 25, pp. 437-562.

Zhen, X., Wang, Y. e Liu, D. 2017. An overview of the chemical reaction mechanisms for gasoline surrogate fuels. *Applied Thermal Engineering*. 2017, Vol. 124, pp. 1257-1268.

Zhong, Bei-Jing e Zheng, Dong . 2014. A chemical mechanism for ignition and oxidation of multi-component gasoline surrogate fuels. *F*. 2014, Vol. 128, pp. 458-466.

ANEXO A

A.1 Dados experimentais

Contratou-se ensaios experimentais para a construção de um banco de dados do desempenho global do Motor Monocilindro de Pesquisa (SCRE), utilizando um sistema de injeção direta e operando com diferentes misturas de Etanol Anidro com Gasolina Padrão L6 (E10, E22, E27, E50, E85), Etanol Hidratado (E100) e Gasolina Padrão L6 (E0).

O sistema de aquisição e monitoramento do banco de provas do motor monocilindro de pesquisa foi composto por quatro diferentes sistemas: PUMA, INDICOM, NAPRO, ETU. O PUMA fez a aquisição e monitoramento dos dados do dinamômetro, tais como: temperatura dos fluidos do motor, vazão de ar, vazão de combustível, lambda, temperatura e pressão nas regiões de interesse, o consumo específico e a eficiência de conversão de combustível.

O INDICOM fez aquisição e monitoramento da pressão dentro do cilindro e nos coletores de admissão e escapamento, além de receber o sinal de injeção direta (sinal TTL de acionamento) e ignição (corrente e tensão-TTL no primário). Também fez a análise da combustão, sendo calculados e indicados os seguintes parâmetros: MBF50, MBF10-90, MBF10-50, MBF50-90, SOC, COV-NIMEP e COV-PMAX. Adicionalmente, ele forneceu informações sobre o IMEP e visualização da curva de pressão.

O sistema NAPRO mediu em volume os 4 principais poluentes gasosos, CO, CO₂, NO_x e HC. E o *software* da ETU fez o gerenciamento eletrônico do motor, ou seja, ajustou o momento da ignição, da injeção de combustível, o *setup* de *dwell* da bobina, o tempo de injeção e a pressão da linha de injeção direta.

Os ensaios experimentais foram realizados em condições ambientais uniformes. A temperatura de água, óleo e combustível foram mantidas uniformes durante o período de ensaios. Sendo o esquema geral da instrumentação do SCRE ilustrado na Figura A.1, e a tabela de dados experimentais fornecidos, com sua forma de cálculo ou medição são mostrados na Tabela A.1.

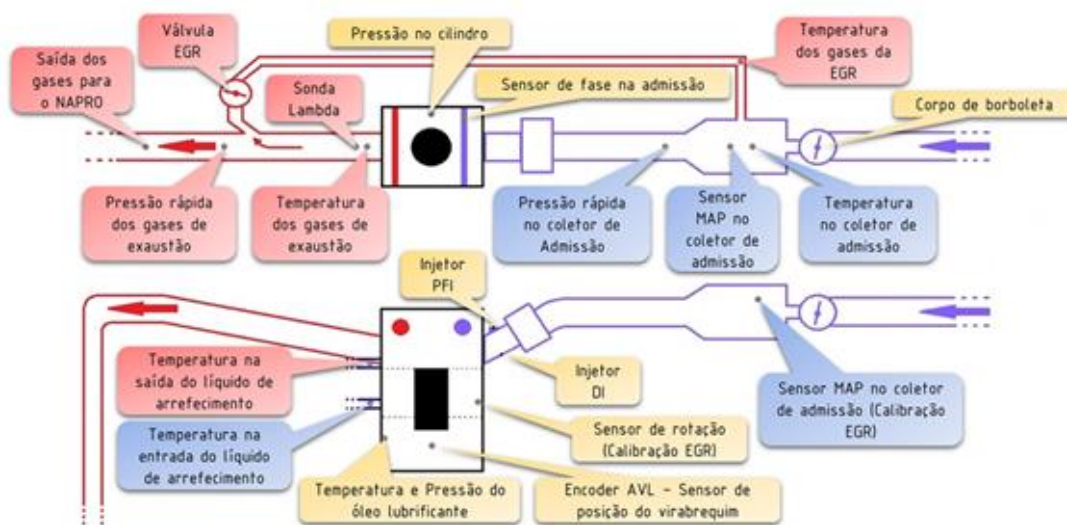


Figura A.1 - Esquema geral da bancada de provas do SCRE sendo o Sistema EGR opcional. Fonte: CTM-UFMG

Tabela A.1 – Grandezas obtidas nos ensaios experimentais. Fonte: CTM-UFMG

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 - DPMI [°]	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 ESTÁTISTICOS, 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)IMEP
CALCULADO NÍVEL III	PARÂMETRO CALCULADO A PARTIR DE MODELO MATEMÁTICO COMPLEXO. EX. (X)MBF

Adicionalmente foi possível exportar as médias de 200 ciclos das curvas de pressão no cilindro, pressão na admissão, pressão no escapamento, taxa de liberação de calor e fração de massa queimada.

Dessa forma, algumas das grandezas calculadas que foram utilizadas em comparação aos resultados numéricos podem ser descritas abaixo:

Cálculo do consumo específico de combustível indicado (ISFC)

$$ISFC = 1000 \frac{\dot{m}_{fuel}}{Pot_{ind}} \left[\frac{g}{kWh} \right]$$

Onde,

\dot{m}_{fuel} , vazão mássica de combustível medida [kg/h]

Pot_{ind} , potência indicada [kW]

Sendo que a potência indicada é dada por

$$Pot_{ind} = \frac{NIMEP \cdot V_d}{1200000} \cdot n \text{ [kW]}$$

Onde,

NIMEP, pressão media efetiva indicada [bar]

\forall_d , deslocamento volumétrico do pistão [cm³] – (454cm³ SCRE)

n, regime de rotação [rpm]

Cálculo da eficiência de conversão de combustível indicada (η_{ts})

$$\eta_{ts} = \frac{360000}{PCI \cdot ISFC} \quad [\%]$$

PCI, poder calorífero inferior do combustível [MJ/kg] – (E22 42,68MJ/kg / E100 26,36 MJ/kg)

ISFC, consumo específico de combustível indicado [g/kWh]

Cálculo da eficiência da combustão (η_c)

$$\eta_c = \frac{\frac{(Q_{at}n)}{120}}{\dot{m}_{fuel} \cdot PCI} \cdot \frac{360}{1000} \quad [\%]$$

Onde,

Q_{at} , calor total líquido liberado, dada por:

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

ANEXO B

B.1 Dados unidimensionais extraídos no GT-Power

Da Figura B.1 a Figura B.7 mostram os resultados unidimensionais do modelo completo do GT-Power para a condição de operação 3, ou seja, na rotação de 3000 rpm, 6 bar de BMEP e com o combustível E50.

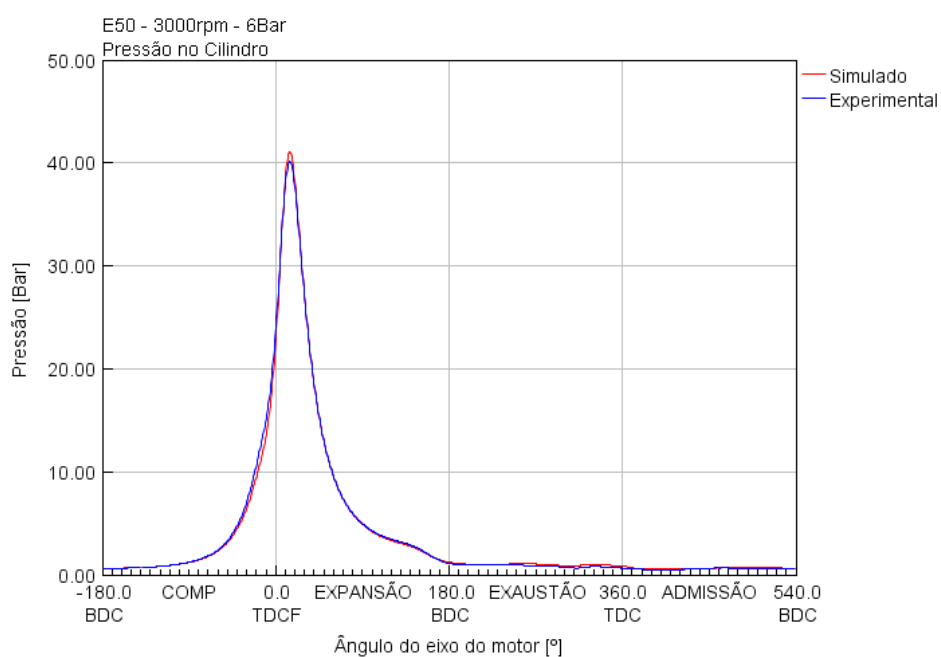


Figura B.1 - Pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do motor para a condição de operação 3 (E50, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

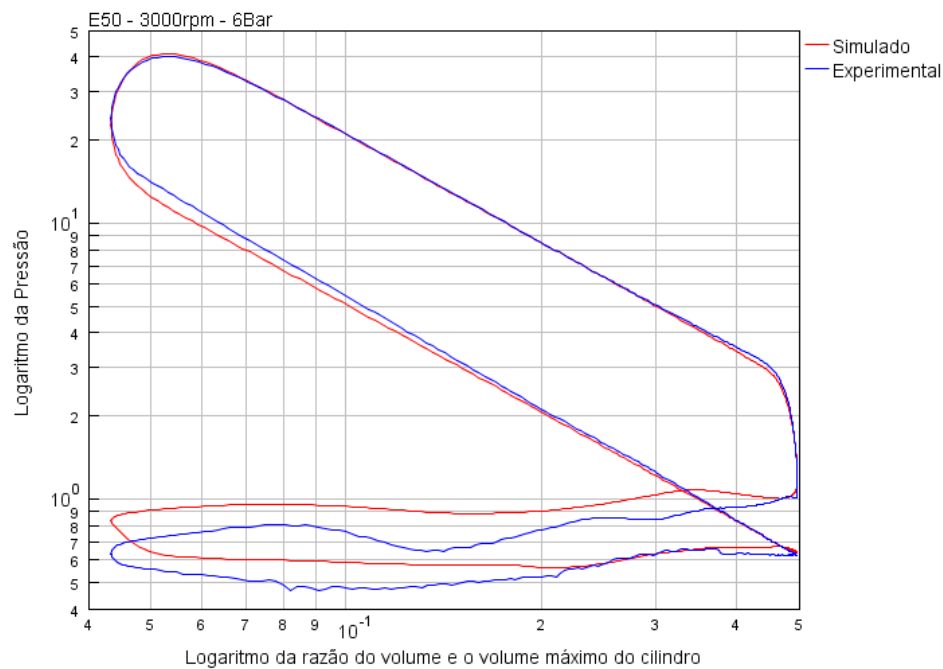


Figura B.2 - Logaritmo da pressão no cilindro em função do logaritmo da razão do volume do cilindro e o volume máximo do cilindro para a condição de operação 3 (E50, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

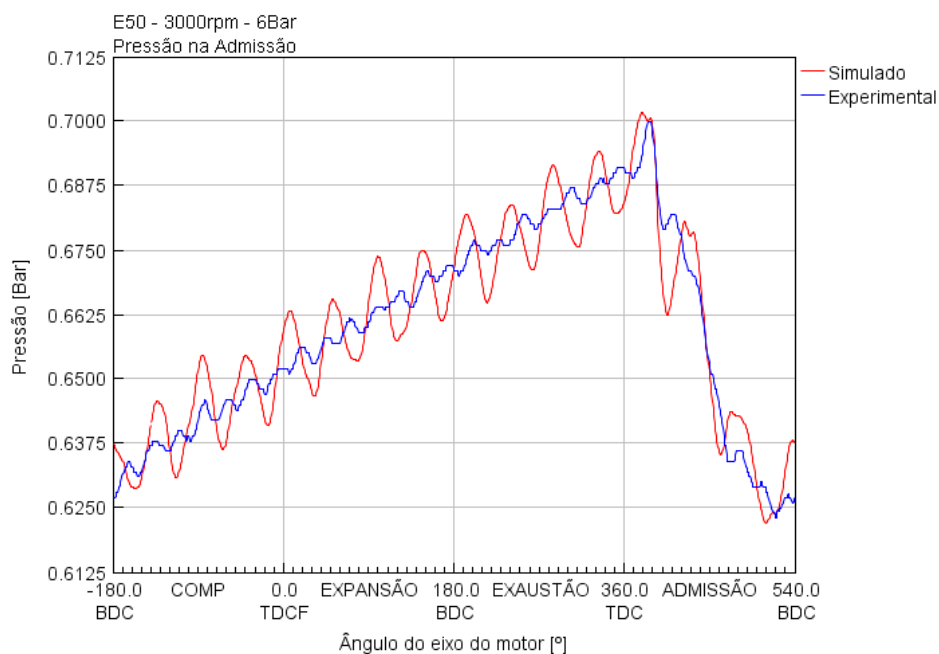


Figura B.3 - Pressão da admissão em função do ângulo do eixo do motor para a condição de operação 3 (E50, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

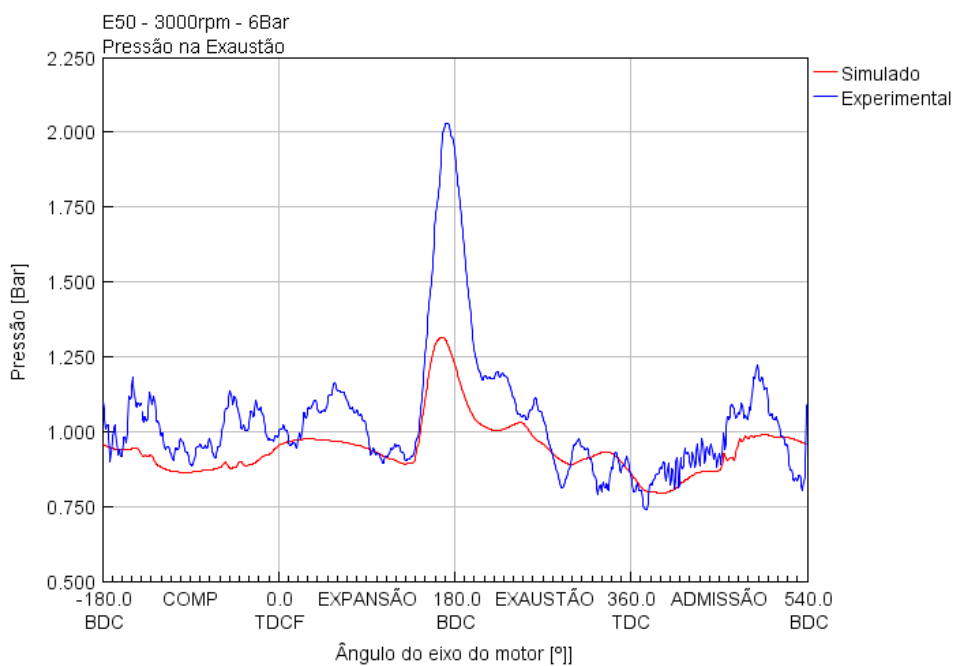


Figura B.4 - Pressão da exaustão em função do ângulo do eixo do motor para a condição de operação 3 (E50, 3000 rpm e 6 Bmep) . Fonte: Autor

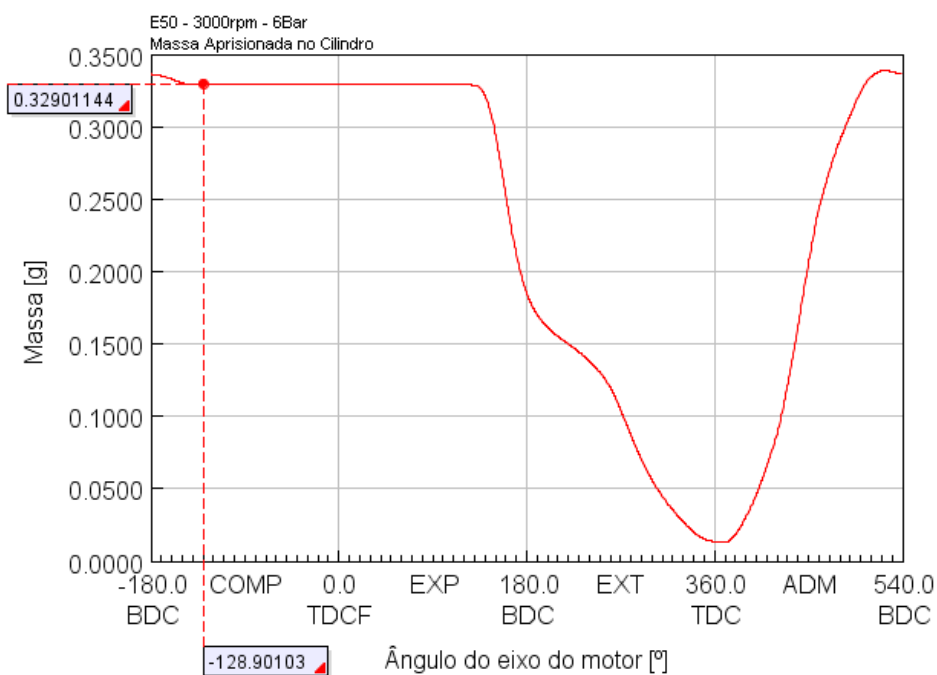


Figura B.5 - Massa aprisionada no cilindro em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 3 (E50, 3000 rpm e 6 Bmep).

Fonte: Autor

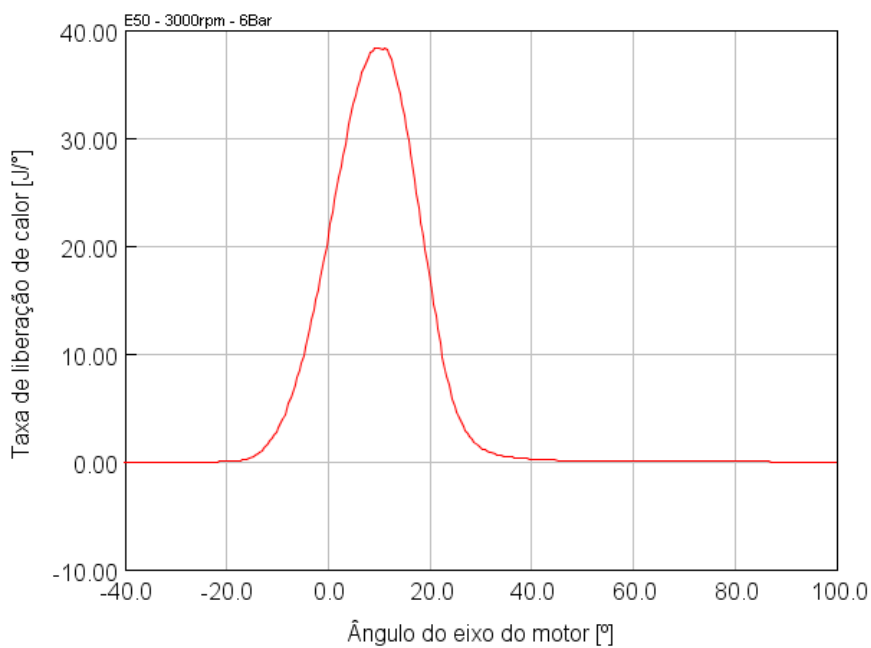


Figura B.6 - Taxa de liberação de calor em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 3 (E50, 3000 rpm e 6 Bmep).

Fonte: Autor

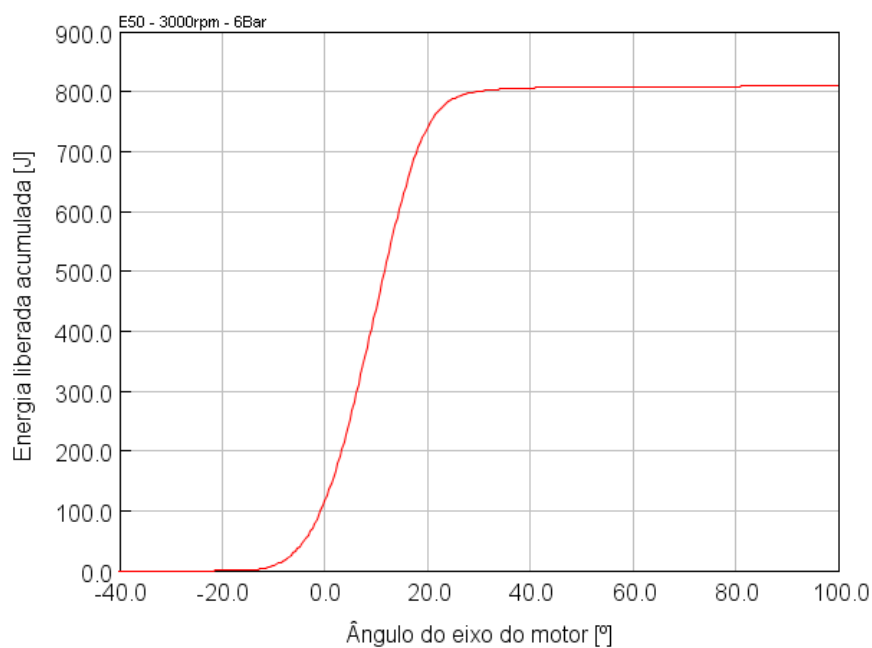


Figura B.7 - Energia liberada acumulada em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 3 (E50, 3000 rpm e 6 Bmep).

Fonte: Autor

Da Figura B.8 a Figura B.14 mostra os resultados unidimensionais do modelo completo do GT-Power para a condição de operação 4, ou seja, na rotação de 3000 rpm, 6 bar de BMEP e com o combustível E85.

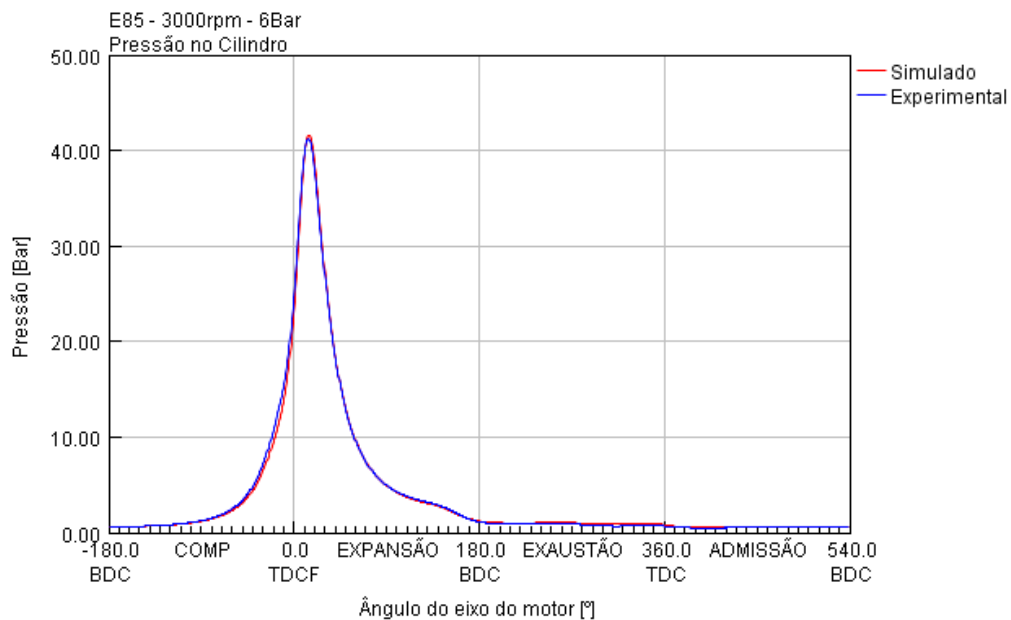


Figura B.8 - Pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do motor para a condição de operação 4 (E85, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

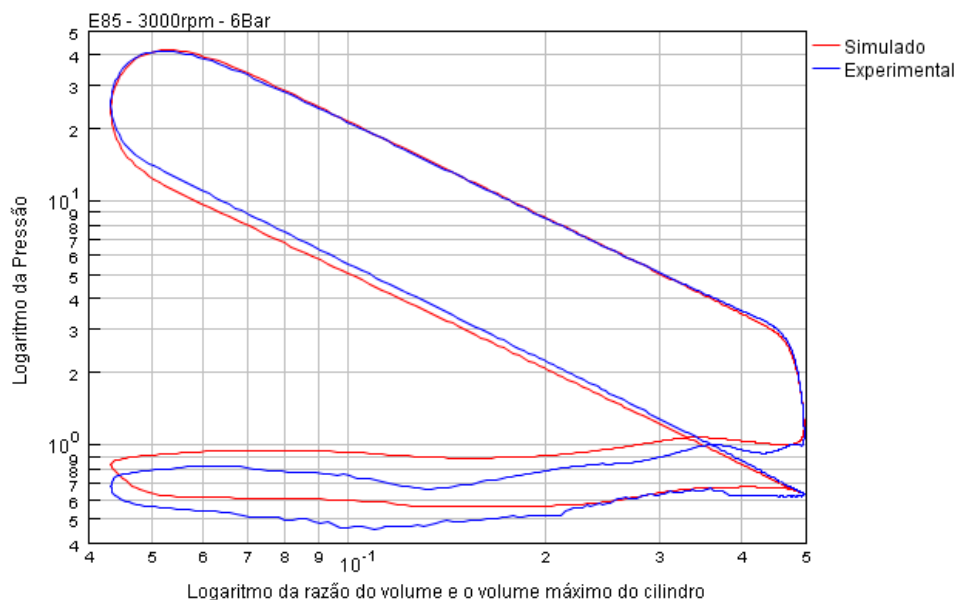


Figura B.9 - Logaritmo da pressão no cilindro em função do logaritmo da razão do volume do cilindro e o volume máximo do cilindro para a condição de operação 4 (E85, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

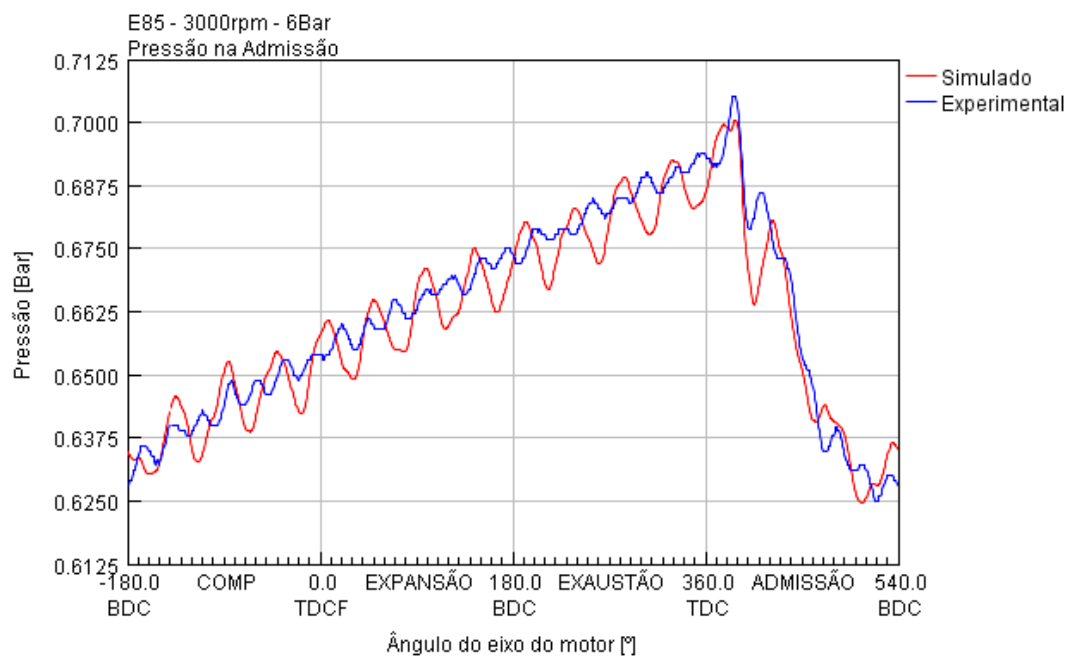


Figura B.10 - Pressão da admissão em função do ângulo do eixo do motor para a condição de operação 4 (E85, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

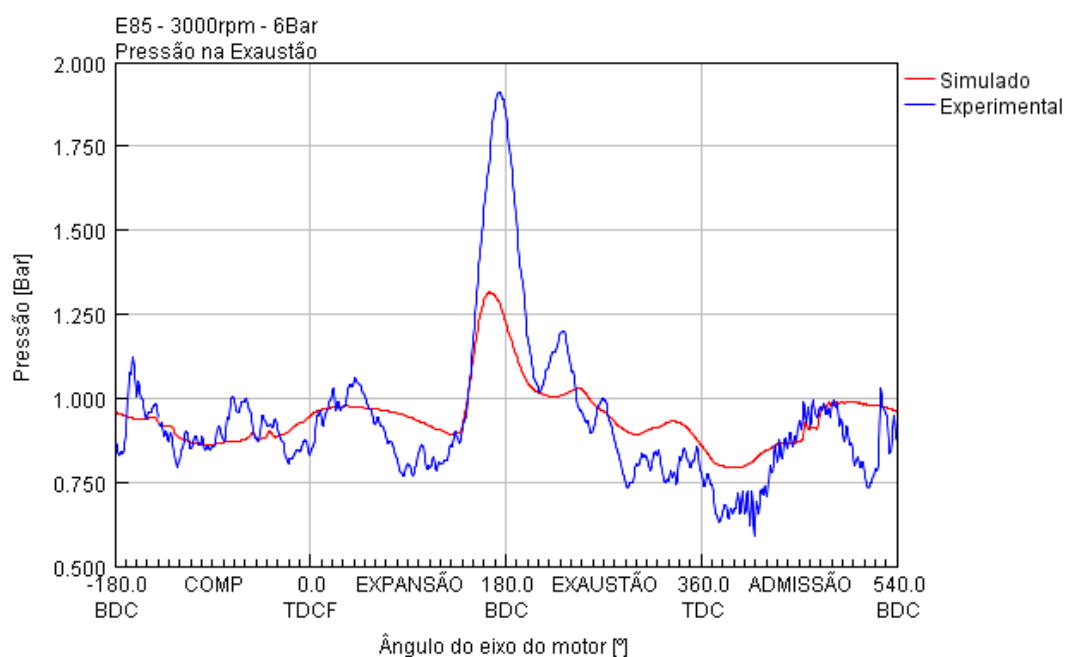


Figura B.11 - Pressão da exaustão em função do ângulo do eixo do motor para a condição de operação 4 (E85, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

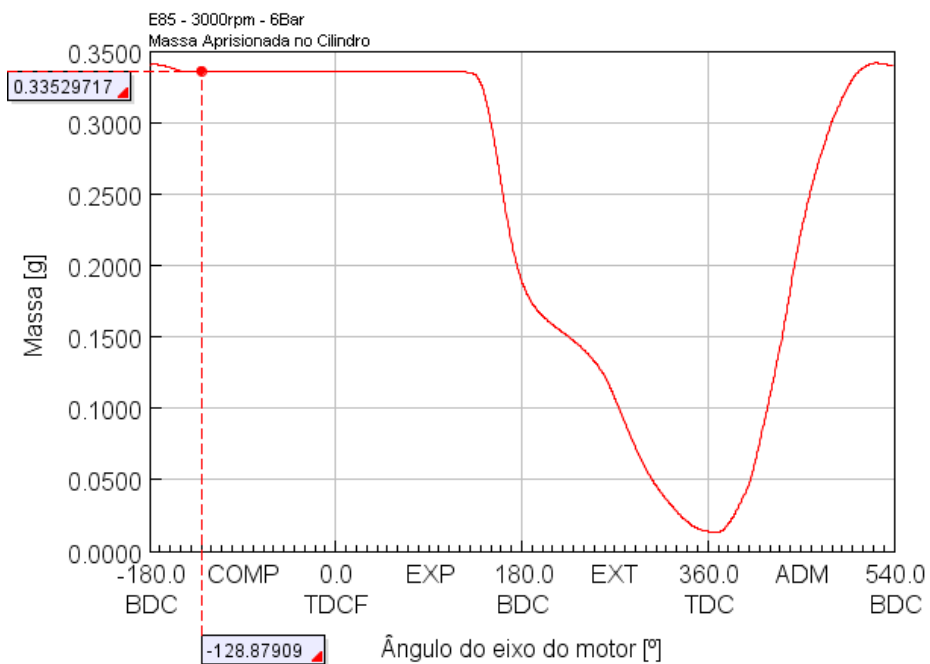


Figura B.12 - Massa aprisionada no cilindro em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 4 (E85, 3000 rpm e 6 Bmep).

Fonte: Autor

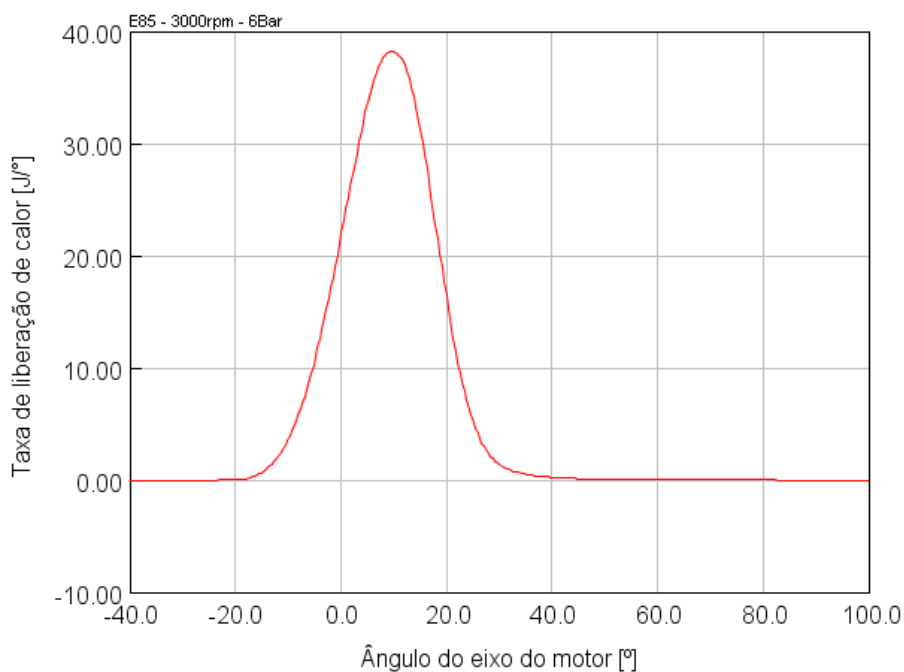


Figura B.13 - Taxa de liberação de calor em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 4 (E85, 3000 rpm e 6 Bmep).

Fonte: Autor

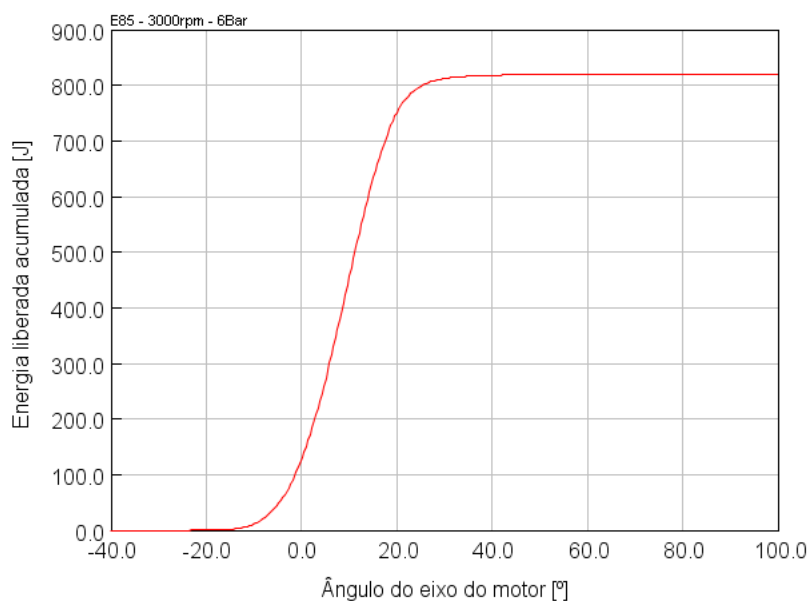


Figura B.14 - Energia liberada acumulada em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 4 (E85, 3000 rpm e 6 Bmep).

Fonte: Autor

Da Figura B.15 a Figura B.21 mostra os resultados unidimensionais do modelo completo do GT-Power para a condição de operação 5, ou seja, na rotação de 3000 rpm, 6 bar de BMEP e com o combustível E100.

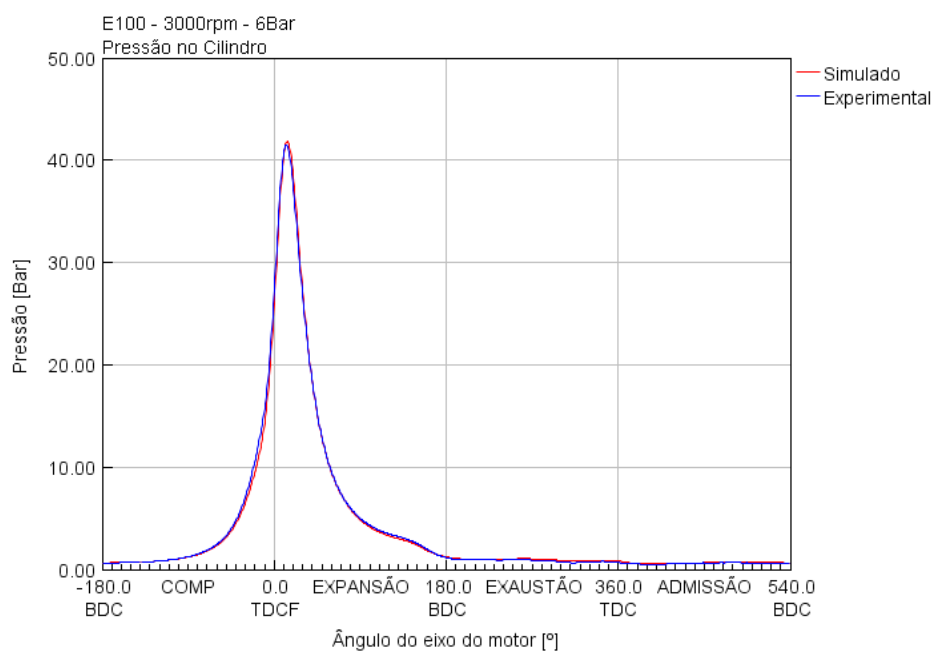


Figura B.15 - Pressão no cilindro em função do ângulo do eixo do motor para a condição de operação 5 (E100, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

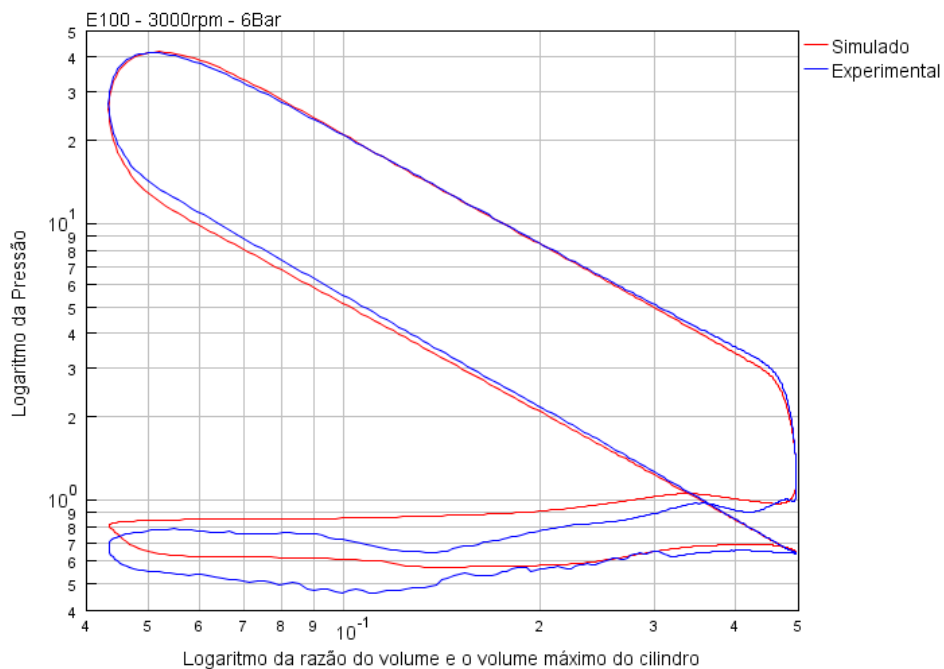


Figura B.16 - Logaritmo da pressão no cilindro em função do logaritmo da razão do volume do cilindro e o volume máximo do cilindro para a condição de operação 5 (E100, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

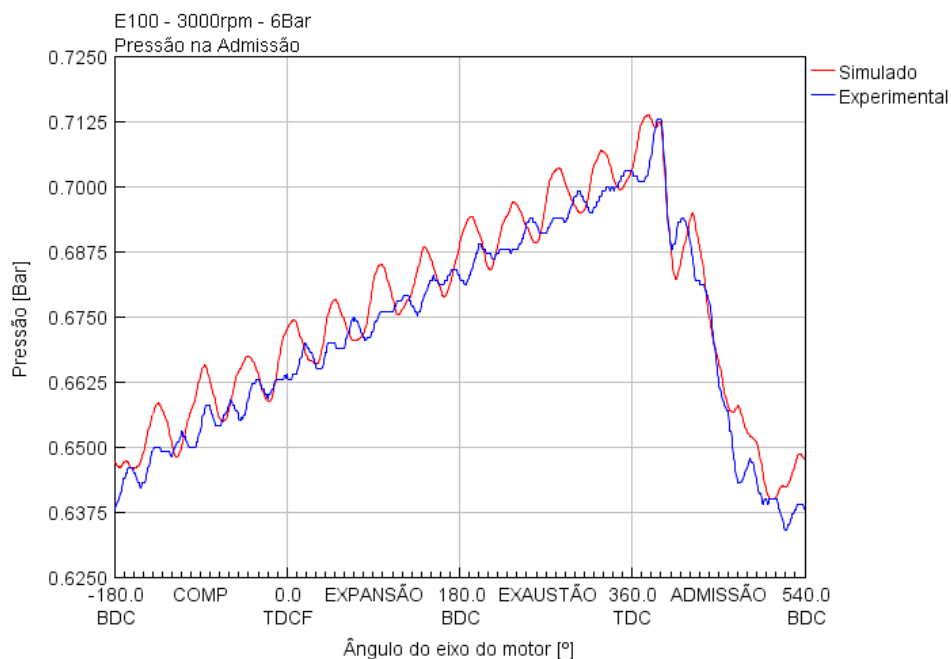


Figura B.17 - Pressão da admissão em função do ângulo do eixo do motor para a condição de operação 5 (E100, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

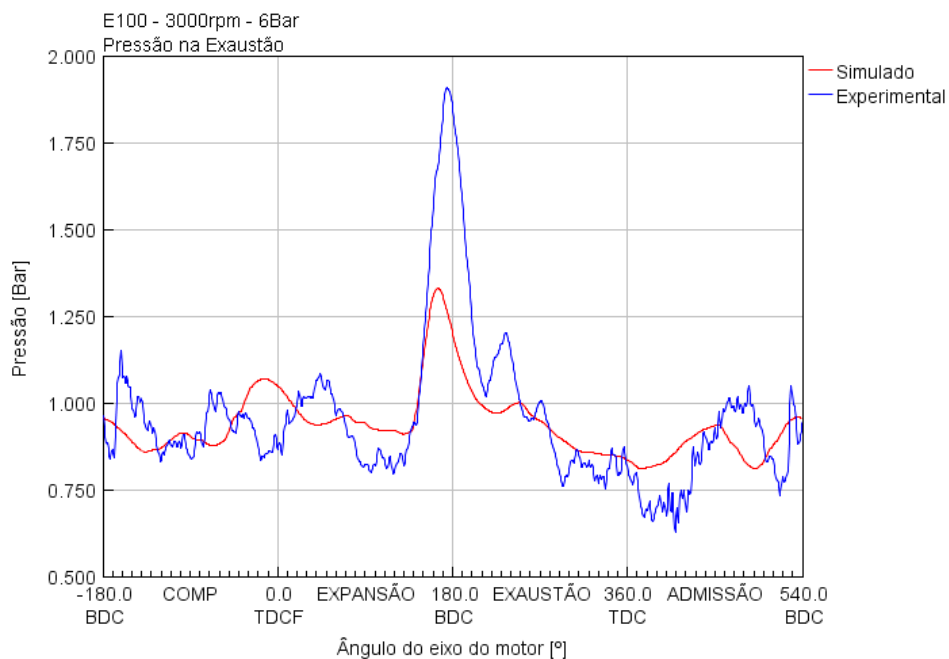


Figura B.18 - Pressão da exaustão em função do ângulo do eixo do motor para a condição de operação 5 (E100, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor

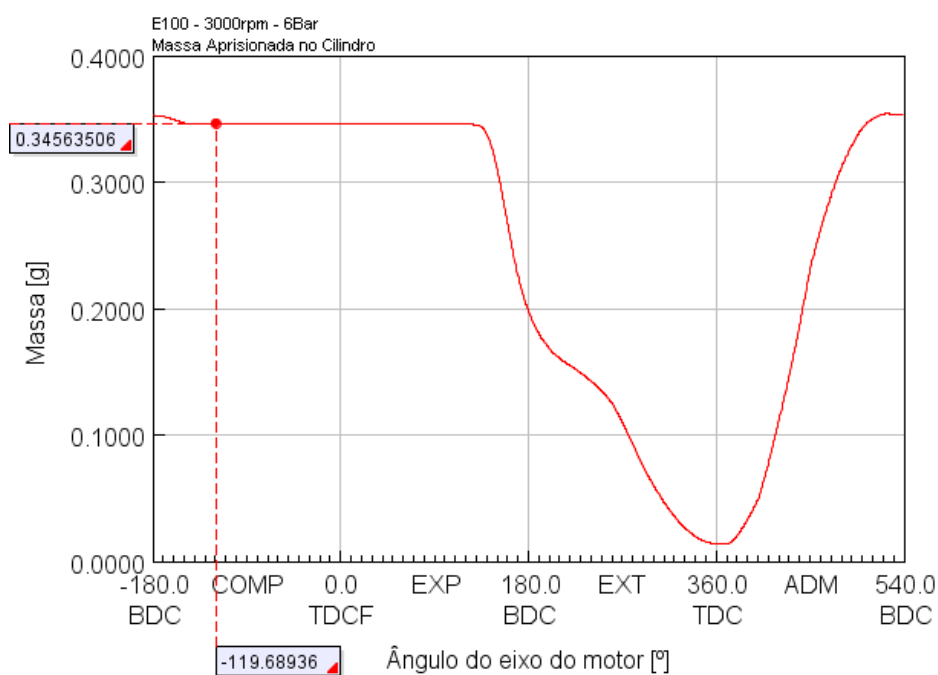
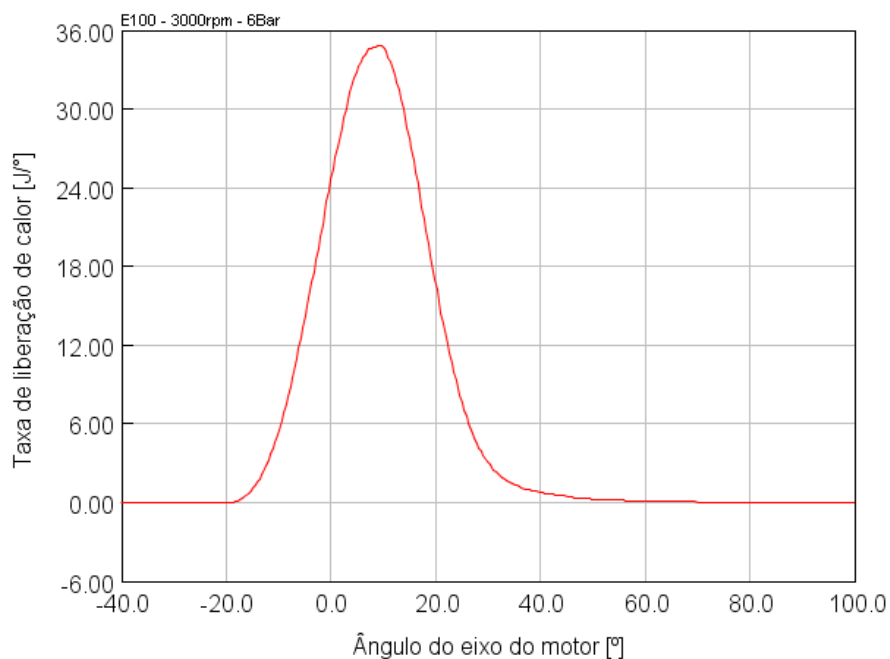
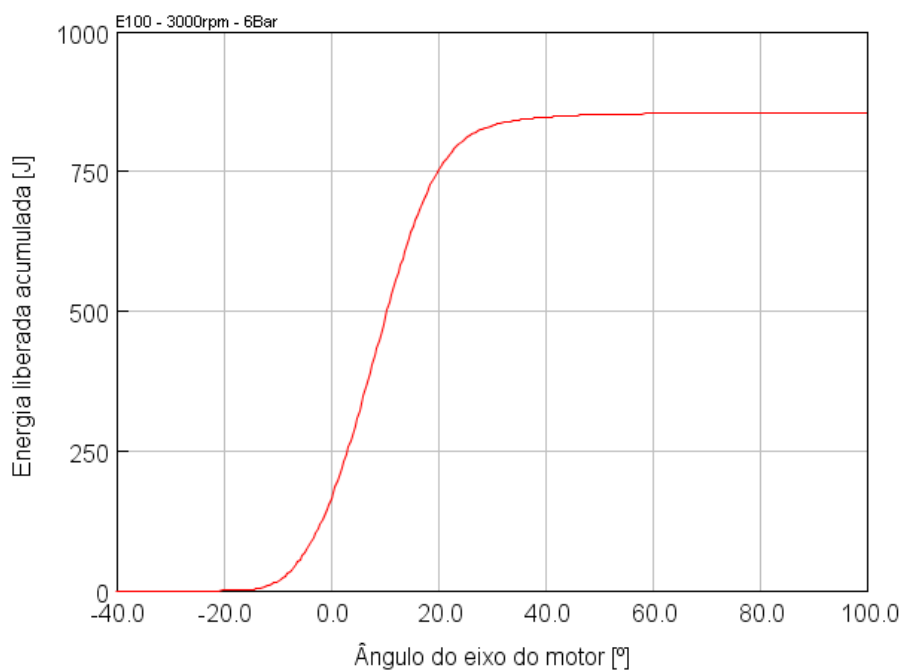


Figura B.19 - Massa aprisionada no cilindro em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 5 (E100, 3000 rpm e 6 Bmep). Fonte: Autor



**Figura B.20 - Taxa de liberação de calor em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 1 (E100, 3000 rpm e 6 Bmep).
Fonte: Autor**



**Figura B.21 - Energia liberada acumulada em função do ângulo do eixo do motor calculada no GT-Power para a condição de operação 1 (E100, 3000 rpm e 6 Bmep).
Fonte: Autor**