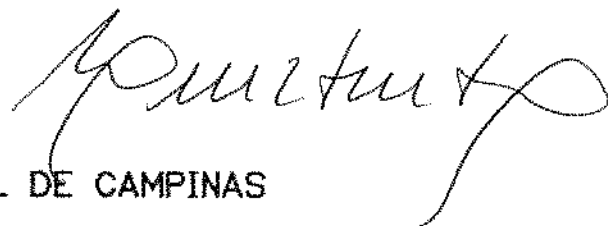


Este exemplar corresponde à redação final da
tese defendida por Waldyr Luiz Ribeiro Gallo e
aprovada pela Comissão Julgadora em 06/12/90



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECANICA
DEPARTAMENTO DE ENERGIA

GALLO

ANÁLISE EXERGÉTICA DE MOTORES
A GASOLINA E A ALCOOL

028/90

TRABALHO APRESENTADO À COMISSÃO DE PÓS - GRADUAÇÃO
DA FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA,
COMO PARTE DOS REQUISITOS PARA A
OBTENÇÃO DO TÍTULO DE DOUTOR
EM ENGENHARIA MECÂNICA

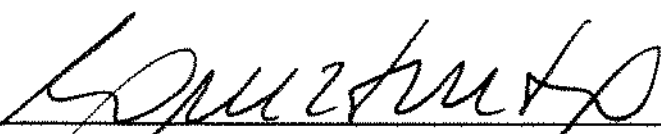
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECANICA
DEPARTAMENTO DE ENERGIA

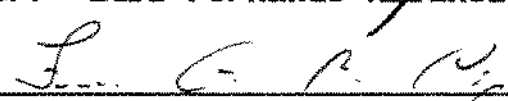
TESE DE DOUTORADO

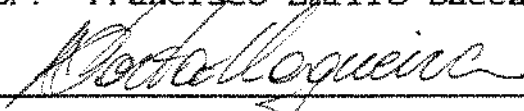
ANÁLISE EXERGETICA DE MOTORES
A GASOLINA E A ÁLCOOL

Autor: Waldyr Luiz Ribeiro Gallo
Orientador: Prof. Dr. Luiz Fernando Milanez

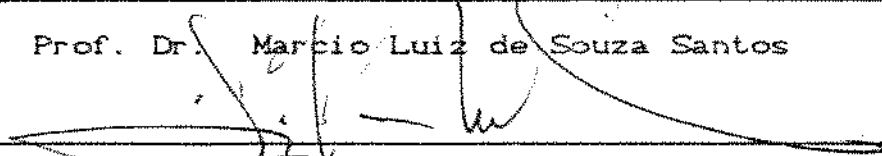
APROVADA POR:


Prof. Dr. Luiz Fernando Milanez


Prof. Dr. Francisco Emilio Baccaro Nigro


Prof. Dr. Luiz Augusto Horta Nogueira


Prof. Dr. Marcio Luiz de Souza Santos


Prof. Dr. Silvia Azucena Nebra de Perez

Para

minha esposa e companheira Ana Maria

minhas filhas Luana e Diana

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Luiz Fernando Milanez, pela orientação
sempre segura e amiga.

Aos professores do Departamento de Energia
pela amizade, apoio e sugestões.

Aos funcionários do Departamento de Energia
pelo apoio sempre solícito.

A todos que, direta ou indiretamente, contribuíram
para a realização deste trabalho.

ANÁLISE EXERGÉTICA DE MOTORES A GASOLINA E A ÁLCOOL

RESUMO

Este trabalho apresenta um modelo de simulação para motores de ignição por centelha que inclui a transmissão de calor instantânea, o processo de combustão com duração finita bem como os processos de admissão e escape. O modelo desenvolvido realiza os cálculos de propriedades termodinâmicas - incluindo a exergia - de cada parcela do fluido operante (ar, combustível, resíduos de combustão, produtos de combustão) e suas misturas.

Além das características comuns aos modelos termodinâmicos de simulação, a determinação da irreversibilidade instantânea, das eficiências exergéticas de cada processo e uma análise exergética global para o ciclo estão incluídas.

Com base no método de simulação desenvolvido são apresentadas as análises de Primeira e Segunda Leis para um estudo paramétrico que inclui os efeitos de rotação, qualidade da mistura, carga, sincronismo de válvulas e parâmetros da combustão. As características específicas de um motor a álcool são comparadas às de uma versão à gasolina do mesmo motor também com base na análise exergética, com especial ênfase quanto à destruição de exergia no processo de combustão.

EXERGETIC ANALYSIS OF SPARK IGNITION INTERNAL COMBUSTION ENGINES USING GASOLINE OR ALCOHOL AS FUEL

ABSTRACT

In this work a model is developed to simulate the heat transfer, combustion, admission and exhaust processes in spark-ignition internal combustion engines. The model obtained is able to evaluate the thermodynamic properties - including the exergy - of each portion of the working fluid (air, fuel, combustion products and residues).

Usual characteristics obtained from thermodynamic models of simulation are presented. Also included are the determination of the instantaneous irreversibility, the exergetic efficiency for each process and an overall exergetic analysis.

First and second law analysis are presented, based on the method of simulation proposed. In this parametric study the effects of engine speed, air/fuel ratio, engine load, valve events and combustion parameters are discussed. Particular characteristics of an alcohol engine are compared to the gasoline version of the same engine also based on exergetic analysis, with special attention to the exergy destruction in the combustion process.

INDICE

	pag.
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO 2 - A ANÁLISE EXERGÉTICA DE PROCESSOS TERMODINÂMICOS.....	5
2.1 - Introdução.....	5
2.2 - Histórico.....	7
2.3 - Os conceitos de geração de entropia, exergia e irreversibilidade.....	8
2.3.1 - Geração de entropia.....	8
2.3.2 - Irreversibilidade e o Teo. de Gouy-Stodola...	9
2.3.3 - O conceito de exergia.....	10
2.3.4 - A exergia termomecânica.....	11
2.3.5 - A exergia termoquímica.....	17
2.4 - Estados de referência - exergia química padrão....	23
2.5 - Eficiências exergéticas.....	30
2.6 - Recomendações.....	34
CAPÍTULO 3 - CÁLCULO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS.....	36
3.1 - Introdução.....	36
3.2 - Cálculos preliminares de propriedades.....	37
3.3 - As propriedades de cada substância.....	40
3.4 - A composição de equilíbrio químico.....	45
3.5 - As propriedades da mistura de gases.....	53
3.6 - A exergia total da mistura de gases.....	54
CAPÍTULO 4 - O MODELO DE SIMULAÇÃO.....	58
4.1 - Introdução.....	58
4.2 - Características Geométricas.....	60
4.3 - A transmissão de calor instantânea.....	65

4.4 - O processo de combustão.....	73
4.5 - A fase fechada do ciclo.....	81
4.6 - O escoamento através de válvulas.....	83
4.7 - A fase aberta do ciclo.....	87
4.8 - A convergência global do modelo de simulação.....	91
4.9 - Análise exergética de cada processo e global.....	94
 CAPÍTULO 5 - OS RESULTADOS DA ANÁLISE PARAMÉTRICA.....	100
5.1 - Introdução.....	100
5.2 - Resultados típicos do modelo de simulação.....	102
5.3 - A irreversibilidade de cada processo.....	115
5.4 - Análise exergética da combustão.....	123
5.5 - Análise exergética da fase aberta.....	134
5.6 - Comparação álcool - gasolina.....	148
 CAPÍTULO 6 - CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	158
 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	163
 APÊNDICE 1 - COMPOSIÇÃO QUÍMICA DOS PRODUTOS DE COMBUSTÃO..	177
 APÊNDICE 2 - RELAÇÕES GEOMÉTRICAS.....	196
A.2.1 - A elevação instantânea das válvulas.....	196
A.2.2 - A área mínima para o escoamento através das válvulas.....	200
 APÊNDICE 3 - COEFICIENTES DE PELÍCULA INSTANTÂNEOS.....	206
 APÊNDICE 4 - A FUNÇÃO DE WIEBE.....	220
 APÊNDICE 5 - FLUXOGRAMAS DOS PROGRAMAS.....	227
 APÊNDICE 6 - COEFICIENTES DE DESCARGA DAS VÁLVULAS.....	255

LISTA DE FIGURAS

	PAG.
Figura 2.1 - O sistema combinado.....	12
Figura 2.2 - O volume de controle.....	15
Figura 2.3 - Produção de trabalho químico.....	17
Figura 2.4 - Sistema combinado com trabalho químico.....	18
Figura 2.5 - A célula de reação reversível.....	21
Figura 2.6 - Os módulos de Kotas para a exergia total.....	23
Figura 2.7 - Fluxos de exergia para um volume de controle.	32
Figura 4.1 - A geometria do motor a pistão.....	61
Figura 4.2 - A geometria da câmara de combustão.....	63
Figura 4.3 - A elevação instantânea das válvulas.....	64
Figura 4.4 - A taxa de liberação de energia típica em em um motor diesel.....	75
Figura 4.5 - A taxa de liberação de energia segundo diferentes perfis.....	81
Figura 4.6 - Um volume de controle para o escoamento.....	84
Figura 5.1 - O Diagrama Indicador - versão a álcool.....	103
Figura 5.2 - O Diagrama Indicador - versão a gasolina.....	104
Figura 5.3 - Diagrama $\log(P) \times \log(V)$ - versão álcool.....	105
Figura 5.4 - Diagrama $\log(P) \times \log(V)$ - versão gasolina...	105
Figura 5.5 - Comparação álcool - gasolina: Compressão.....	106
Figura 5.6 - Comparação álcool - gasolina: Combustão.....	106
Figura 5.7 - Comparação álcool - gasolina: Expansão.....	107
Figura 5.8 - Comparação álcool - gasolina: Escape.....	107
Figura 5.9 - Comparação álcool - gasolina: Admissão.....	108
Figura 5.10 - A temperatura na primeira metade do ciclo...	109
Figura 5.11 - A temperatura na segunda metade do ciclo....	109
Figura 5.12 - O efeito da carga: versão a álcool.....	110

Figura 5.13 - O efeito da rotação sobre os parâmetros de eficiência. Versão a álcool.....	111
Figura 5.14 - O efeito da relação de ar teórico sobre os parâmetros de eficiência. Versão a álcool.....	112
Figura 5.15 - O efeito da relação de ar teórico sobre os parâmetros de eficiência. Versão a gasolina.....	113
Figura 5.16 - Rendimento volumétrico e fração de gás residual em função do coeficiente de ar teórico.....	115
Figura 5.17 - Irreversibilidade na Compressão.....	116
Figura 5.18 - Irreversibilidade na Combustão.....	117
Figura 5.19 - Irreversibilidade na Expansão.....	117
Figura 5.20 - Irreversibilidade no Escape.....	118
Figura 5.21 - Irreversibilidade na Admissão.....	118
Figura 5.22 - Diagrama de mola fraca: efeito da rotação...	120
Figura 5.23 - As temperaturas durante a combustão.....	123
Figura 5.24 - O efeito do ponto de ignição.....	124
Figura 5.25 - O efeito do parâmetro de duração.....	126
Figura 5.26 - O efeito do fator de forma.....	126
Figura 5.27 - Irreversibilidade e Temperaturas.....	128
Figura 5.28 - O efeito do ponto de ignição sobre a irreversibilidade por unidade de massa que queima.....	129
Figura 5.29 - O efeito do parâmetro de duração sobre a irreversibilidade por unidade de massa que queima.....	129
Figura 5.30 - O efeito do fator de forma sobre a irreversibilidade por unidade de massa que queima.....	130
Figura 5.31 - O efeito do coeficiente de ar teórico sobre a irreversibilidade da combustão.....	134
Figura 5.32 - O fluxo de massa através da válvula de escape. Motor a álcool.....	135
Figura 5.33 - O fluxo de massa através da válvula de admissão. Motor a álcool.....	136
Figura 5.34 - Efeito do sincronismo de válvulas sobre o diagrama de mola fraca. Motor a álcool.....	142

Figura 5.35 - Efeito do sincronismo de válvulas sobre a irreversibilidade por grau. Motor a álcool.....	143
Figura 5.36 - O efeito da carga no diagrama indicador de alta pressão. Motor a álcool, 5200 rpm.....	146
Figura 5.37 - O efeito da carga no diagrama indicador de alta pressão. Motor a álcool, 2000 rpm.....	146
Figura 5.38 - O efeito da carga no diagrama indicador de baixa pressão. Motor a álcool, 5200 rpm.....	147
Figura 5.39 - O efeito da carga no diagrama indicador de baixa pressão. Motor a álcool, 2000 rpm.....	147
Figura 5.40 - Efeito do combustível sobre a irreversibilidade por grau na combustão.....	155
Figura 5.41 - Efeito do combustível sobre a irreversibilidade por unidade de massa na combustão.....	155
Figura A1.1 - Comparação com a ref.[23]: Nitrogênio.....	178
Figura A1.2 - Fração molar do Argônio.....	178
Figura A1.3 - Comparação com a ref.[23]: Oxigênio.....	179
Figura A1.4 - Comparação com a ref.[23]: Dióxido de Carb..	179
Figura A1.5 - Comparação com a ref.[23]: Água.....	180
Figura A1.6 - Comparação com a ref.[23]: Monóxido de Carb.	180
Figura A1.7 - Comparação com a ref.[23]: Hidrogênio.....	181
Figura A1.8 - Comparação com a ref.[23]: Monóxido de Nitrog	181
Figura A1.9 - Comparação com a ref.[23]: Hidroxila.....	182
Figura A1.10 - Comparação com a ref.[23]: Hidrogênio Atôm..	182
Figura A1.11 - Comparação com a ref.[23]: Oxigênio Atôm....	183
Figura A1.12 - Comparação com a ref.[92]: Nitrog. Atôm....	183
Figura A1.13 - O efeito de α sobre o Nitrogênio.....	184
Figura A1.14 - O efeito de α sobre o Oxigênio.....	185
Figura A1.15 - O efeito de α sobre o Dióxido de Carbono....	185
Figura A1.16 - O efeito de α sobre a Água.....	186
Figura A1.17 - O efeito de α sobre o Monóxido de Carb.....	186
Figura A1.18 - O efeito de α sobre o Hidrogênio.....	187
Figura A1.19 - O efeito de α sobre o Monóxido de Nitrog....	187

Figura A1.20 - O efeito de α sobre a Hidroxila.....	188
Figura A1.21 - O efeito de α sobre o Nitrogênio Atômico....	188
Figura A1.22 - O efeito de α sobre o Hidrogênio Atômico....	189
Figura A1.23 - O efeito de α sobre o Oxigênio Atômico.....	189
Figura A1.24 - O efeito de α sobre o Argônio.....	190
Figura A1.25 - O efeito de α sobre o Nitrogênio.....	191
Figura A1.26 - O efeito de α sobre o Oxigênio.....	191
Figura A1.27 - O efeito do teor alcoólico: Nitrogênio.....	192
Figura A1.28 - O efeito do teor alcoólico: Água.....	192
Figura A1.29 - O efeito da umidade do ar: Nitrogênio.....	193
Figura A1.30 - O efeito da umidade do ar: Água.....	194
Figura A1.31 - Efeito combinado: umidade do ar e do AEHC...	195
Figura A1.32 - Efeito combinado: umidade do ar e do AEHC...	195
Figura A2.1 - Elevação, velocidade e aceleração de uma válvula: modelo parabólico.....	196
Figura A2.2 - O efeito da relação de acelerações.....	199
Figura A2.3 - O efeito da elevação máxima da válvula.....	200
Figura A2.4 - A geometria de uma válvula padrão.....	201
Figura A2.5 - Pequenas elevações da válvula.....	202
Figura A2.6 - Elevações intermediárias da válvula.....	203
Figura A2.7 - Grande elevação da válvula.....	204
Figura A2.8 - O efeito da elevação máxima sobre a área adimensionalizada.....	205
Figura A3.1 - Coeficientes de película empíricos. Processo de Admissão.....	207
Figura A3.2 - Coeficientes de película semi-empíricos. Processo de Admissão.....	208
Figura A3.3 - Coeficientes de película empíricos. Processo de Admissão.....	208
Figura A3.4 - Coeficientes de película semi-empíricos. Processo de Admissão.....	209
Figura A3.5 - Coeficientes de película empíricos. Processo de Compressão.....	209

Figura A3.6 - Coeficientes de película semi-empíricos.	
Processo de Compressão.....	210
Figura A3.7 - Coeficientes de película empíricos.	
Processo de Combustão.....	211
Figura A3.8 - Coeficientes de película semi-empíricos.	
Processo de Combustão.....	211
Figura A3.9 - Coeficientes de película empíricos.	
Processo de Combustão.....	212
Figura A3.10 - Coeficientes de película semi-empíricos.	
Processo de Combustão.....	212
Figura A3.11 - Coeficientes de película empíricos.	
Processo de Expansão.....	213
Figura A3.12 - Coeficientes de película semi-empíricos.	
Processo de Expansão.....	214
Figura A3.13 - Coeficientes de película empíricos.	
Processo de Exaustão.....	214
Figura A3.14 - Coeficientes de película semi-empíricos.	
Processo de Exaustão.....	215
Figura A3.15 - Coeficientes de película empíricos.	
Efeito da Pressão.....	216
Figura A3.16 - Coeficientes de película semi-empíricos.	
Efeito da Pressão.....	216
Figura A3.17 - Coeficientes de película empíricos.	
Efeito da Temperatura.....	217
Figura A3.18 - Coeficientes de película semi-empíricos.	
Efeito da Temperatura.....	217
Figura A3.19 - Coeficientes de película empíricos.	
Efeito da Velocidade média do pistão.....	218
Figura A3.20 - Coeficientes de película semi-empíricos.	
Efeito da Velocidade média do pistão.....	218
Figura A3.21 - Coeficientes de película empíricos.	
Efeito da Dimensão característica.....	219
Figura A3.22 - Coeficientes de película semi-empíricos.	
Efeito da Dimensão característica.....	219

Figura A4.1 - Perfis da taxa de liberação de energia.....	221
Figura A4.2 - A forma integral dos perfis da Fig.A4.1.....	221
Figura A4.3 - O efeito do parâmetro de eficiência.....	223
Figura A4.4 - O efeito do parâmetro de duração.....	224
Figura A4.5 - O efeito do fator de forma.....	225
Figura A6.1 - Coeficientes de descarga em função da elevação adimensional da válvula.....	258

LISTA DE TABELAS

	pag.
Tabela 2.1 - Composição do ar ambiente.....	25
Tabela 2.2 - Exergia química para algumas substâncias.....	29
Tabela 2.3 - Comparação entre as eficiências exérgica (ϵ) e de Primeira Lei (η).....	34
Tabela 3.1 - Avaliação da equação de Antoine.....	38
Tabela 3.2 - Coeficientes para o calor específico a pressão constante - base molar.....	41
Tabela 3.3 - Coeficientes para o calor específico a pressão constante - base molar - combustíveis.....	42
Tabela 3.4 - Entalpias de formação, entropias a 25°C e uma atmosfera e energia livre de Gibbs de formação.....	43
Tabela 3.5 - Erros relativos percentuais entre os valores calculados e tabelados da constante de equilíbrio químico K_T . Referência [99].....	47
Tabela 3.6 - Efeito da umidade relativa do ar sobre as frações molares de H ₂ O e H ₂ . Octano, α : 1,0 pressão: 10 atm.....	52
Tabela 3.7 - Efeito da umidade presente no combustível sobre as frações molares de H ₂ O e H ₂ . AEHC, α : 1,0. pressão: 10 atm.....	52
Tabela 3.8 - Exergia química padrão molar de alguns elementos químicos, segundo [84].....	55
Tabela 3.9 - Exergia química padrão de algumas substâncias químicas.....	55
Tabela 4.1 - Comparação entre as correlações para os coeficientes de película.....	71
Tabela 5.1 - Condições geométricas e de operação para o motor simulado. Caso base.....	101

Tabela 5.2 - A eficiência exergética de cada processo para rotações variáveis. Versão a álcool.....	121
Tabela 5.3 - O balanço exergético percentual para rotações variáveis. Versão a álcool.....	122
Tabela 5.4 - A influência do ponto de ignição sobre o balanço exergético global. Motor a álcool.....	131
Tabela 5.5 - O efeito do parâmetro de duração sobre o balanço exergético global. Motor a álcool.....	132
Tabela 5.6 - O efeito do fator de forma sobre o balanço exergético global. Motor a álcool.....	132
Tabela 5.7 - Efeito dos parâmetros da função de Wiebe sobre o balanço exergético global. Motor a gasolina.....	133
Tabela 5.8 - O efeito do ponto de abertura da válvula de escape. Motor a álcool.....	138
Tabela 5.9 - O efeito do ponto de abertura da válvula de admissão. Motor a álcool.....	139
Tabela 5.10 - O efeito do ponto de fechamento da válvula de escape. Motor a álcool.....	140
Tabela 5.11 - O efeito do ponto de fechamento da válvula de admissão. Motor a álcool.....	140
Tabela 5.12 - O efeito do cruzamento de válvulas Motor a álcool.....	141
Tabela 5.13 - O efeito da pressão do coletor de escape sobre a fase aberta do ciclo. Motor a álcool.....	144
Tabela 5.14 - O efeito da pressão do coletor de admissão sobre a fase aberta do ciclo. Motor a álcool.....	145
Tabela 5.15 - A eficiência exergética de cada processo em função do coeficiente de ar teórico. Motor a álcool.....	148
Tabela 5.16 - A eficiência exergética de cada processo em função do coeficiente de ar teórico. Motor a gasolina....	149
Tabela 5.17 - O balanço global energético em função do coeficiente de ar teórico. Motor a álcool.....	150
Tabela 5.18 - O balanço global energético em função do coeficiente de ar teórico. Motor a gasolina.....	151

Tabela 5.19 - O balanço exergético global em função do coeficiente de ar teórico. Motor a álcool.....	152
Tabela 5.20 - O balanço exergético global em função do coeficiente de ar teórico. Motor a gasolina.....	153
Tabela 5.21 - Comparação entre as versões a álcool com taxas de compressão 12 e 8 e a versão a gasolina.....	156
Tabela A6.1 - Os coeficientes do polinômio interpolador para o coeficiente de descarga C_D	256
Tabela A6.2 - Coeficientes de descarga em função da elevação instantânea. Valores experimentais, calculados pelo polinômio interpolador e os erros percentuais respectivos.....	257

SIMBOLOGIA ADOTADA

Alfabeto latino

Ac	área do cilindro exposta aos gases
Acb	área do cabeçote do motor
Ap	área do topo do pistão
At	área mínima para o escoamento através de válvulas
ACES	relação ar-combustível estequiométrica - base seca
ACEU	relação ar-combustível estequiométrica - base úmida
ACRS	relação ar-combustível real - base seca
ACRU	relação ar-combustível real - base úmida
C	velocidade
Ca	constante da equação de Antoine
Cb	constante da equação de Antoine
Cc	constante da equação de Antoine
Cd	coeficiente de descarga através de uma válvula
Cp	calor específico a pressão constante
Cv	calor específico a volume constante
[C]	reagente genérico
D	diâmetro do pistão
D	diâmetro nominal de uma válvula
E	energia total de um sistema
Ex	exergia total de um sistema
Exf	exergia total de escoamento
g	aceleração da gravidade
G	energia livre de Gibbs
h	coeficiente de película para a transmissão de calor
H	entalpia
I	irreversibilidade
k	condutibilidade térmica
Kr	constante de equilíbrio químico

K'	constante de equilíbrio químico modificada
L	curso do pistão
m	massa
Mar	massa molecular aparente do ar seco
$Maru$	massa molecular aparente do ar úmido
$Mcom$	massa molecular aparente do combustível úmido
n	número de moles
n_{ae}	número de átomos de oxigênio para combustão estequiométrica
Ne	potência efetiva do motor
Nf	potência de atrito do motor
Ni	potência indicada do motor
Nu	número de Nusselt
P	pressão absoluta
Pc	porcentagem de combustível seco
PCI	poder calorífico inferior de um combustível
Pme	pressão média efetiva
Pmf	pressão média de atrito
Pmi	pressão média indicada
Pv	pressão de vapor d'água no ar
Q	calor transmitido
r	relação entre as acelerações no mecanismo de acionamento das válvulas
R	raio da circunferência descrita pela articulação biela - eixo de manivela
$\bar{R}$	constante universal dos gases perfeitos
Re	número de Reynolds
$Rmolc$	massa molecular do combustível seco
Rpm	rotações por minuto (velocidade angular)
S	entropia
Sg	geração de entropia
Sl	velocidade de chama laminar
St	velocidade de chama turbulenta
$\$$	área de uma superfície de controle
t	tempo

T	temperatura absoluta
t_c	taxa de compressão
T_w	temperatura de parede
U	energia interna
U _A	número de moles de vapor d'água por mol de ar seco
U _c	número de moles de água no combustível
U _{cmc}	número de moles de água no combustível por mol de combustível seco
V	volume
V _p	velocidade média do pistão
v	volume específico
W	trabalho
x	número de moles de combustível seco
X	fração de combustível já queimado (em massa)
y	fração molar
Y	elevação instantânea da válvula
Z	comprimento da biela (centro a centro)
Z _p	altura acima de um referencial de energia potencial gravitacional

Letras gregas

α	coeficiente de ar teórico
ϵ	eficiência exergética (1º tipo)
ϵ'	eficiência exergética (2º tipo)
ϕ	umidade relativa do ar
Φ	função disponibilidade de fluxo
γ	coeficiente de atividade química
γ	relação entre os calores específicos
γ	ângulo entre o eixo do pistão e a biela
η_e	rendimento térmico efetivo
η_i	rendimento térmico indicado
η_m	rendimento mecânico

η_v	rendimento volumétrico
A	função disponibilidade
μ	potencial químico
μ	viscosidade dinâmica
ν	coeficiente estequiométrico de uma reação
θ	ângulo de manivela
ρ	densidade
ω	umidade absoluta do ar
Ω	rotações por segundo (velocidade angular)

Índices

1,2	relativo aos estados inicial e final de um sistema
a	relativo ao ar
aru	relativo ao ar úmido
amb	relativo às condições ambientes
c	relativo ao sistema combinado
c	relativo a uma substância com finalidades energéticas
com	relativo ao combustível
d	relativo a resíduos descartados
e	relativo à entrada de um volume de controle
el	relativo a um elemento químico
est	relativo à relação estequiométrica
f	relativo às condições de formação
L	líquido
m	relativo a uma matéria prima não energética
n	relativo a uma condição necessária
o	relativo ao estado inativo restrito
p	relativo aos produtos de uma reação
r	relativo aos reagentes de uma reação
s	relativo à saída de um volume de controle
sat	relativo à condição de saturação

sc	relativo a uma superfície de controle
st	relativo ao estado de referência padrão
u	útil
v	relativo ao vapor d'água
vc	relativo a um volume de controle

Superescritos

'	taxa de uma grandeza
o	relativo ao estado inativo irrestrito
-	valor em base molar de uma grandeza
tm	termomecânica
q	química

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Os motores de combustão interna têm sido ensaiados experimentalmente desde o início do século e seu projeto atual é fruto dessa extensiva acumulação de conhecimentos práticos. Todavia, o conhecimento dos fenômenos físicos e a identificação precisa dos processos que ocorrem dentro do motor sempre estiveram muito atrasados em relação ao conhecimento prático. Vários são os motivos para essa defasagem entre teoria e experiência, mas os principais problemas residem no fato de se ter processos fora do regime permanente (isto é, processos em que o tempo é uma variável explícita) associados a altas temperaturas, um fluido de trabalho que sofre reações químicas e geometrias complexas de paredes.

Ainda hoje há muitas questões não resolvidas para cada um dos processos (admissão, compressão, combustão, expansão e exaustão), apesar da imensa quantidade de pesquisas que vem sendo desenvolvidas ao longo dos anos. Se, por um lado, o surgimento dos computadores digitais facilitou enormemente o modelamento dos fenômenos internos ao motor, por outro lado as pesquisas experimentais tornaram-se cada vez mais caras e requerem sofisticada instrumentação de medição [1].

Nos EUA, no Japão e na Europa, o assunto mais extensamente pesquisado é o controle de emissões de poluentes, em função da legislação crescentemente restritiva adotada nesses países. Diversas linhas de atuação têm sido desenvolvidas, tais como estudos sobre o mecanismo químico de formação dos poluentes [2-4], métodos de se evitar a formação desses poluentes ou de eliminá-los através do tratamento dos gases de exaustão [5-8], de modo a se obter baixos índices de emissões poluentes sem grandes prejuízos na potência ou no consumo de combustível do motor.

Outra importante linha de pesquisa reside no estudo de combustíveis alternativos. Para motores de ignição por centelha tem sido estudadas misturas de gasolina com álcool etílico ou metílico, o uso de álcool metílico ou etílico puros, gás natural comprimido ou resfriado, e hidrogênio [9-11]. Para motores de ignição por compressão, o uso de óleos vegetais *in natura* ou transesterificados, óleos pesados e outros combustíveis com chama piloto ou aditivos detonantes [12,13]. Neste campo, a implantação do Programa Nacional do Alcool e a industrialização de motores a álcool etílico colocaram o Brasil na posição ímpar de ser um dos poucos países a adotar um combustível alternativo comercialmente e em larga escala. De forma geral, as pesquisas nesta área no Brasil são, em sua esmagadora maioria, puramente de adaptação e otimização dos parâmetros de operação do motor ao novo combustível [14,15], trazendo pouca luz sobre as alterações nos processos internos causadas pela mudança de combustível.

Associado à necessidade de reduzir o consumo de combustível e de reduzir os níveis de emissão de poluentes, tem sido pesquisados também diferentes tipos de motores não convencionais, tais como o motor rotativo [16,17], as turbinas a gás para uso automotivo [18,19], o motor de ciclo Stirling [20] e motores de carga estratificada de diversos tipos [21,22], com maior ou menor sucesso. Dentre esses motores não convencionais sobressaem os motores de carga estratificada como os mais promissores para o controle de emissões com baixo consumo de combustível e sem mudar a arquitetura básica dos motores a pistão.

Com relação ao emprego da análise exergética para motores de combustão interna, há um número bastante reduzido de trabalhos. Patterson [23] incluiu uma análise de Segunda Lei da Termodinâmica em seu trabalho de simulação de um motor de ignição por centelha, empregando o conceito de disponibilidade e usando como exergia química do combustível a energia livre de Gibbs na pressão de uma atmosfera e 25°C. Recentemente Lior e Rudy [24] analisaram um ciclo ar-combustível de um motor de ignição por centelha, adiabático, com fornecimento de calor a volume constante e processos ideais de admissão e exaustão.

Um grupo de pesquisadores de uma grande empresa produtora de

motores diesel publicou uma série de trabalhos [25-28] em que a análise exergética foi empregada para avaliar as perdas e destruição de exergia em motores diesel turboalimentados. Estes estudos foram fundamentais para que as reais possibilidades de um motor adiabático - motor sem sistema de refrigeração e com revestimento cerâmico - fossem descobertas. Aproveitando o mesmo ferramental, esse grupo fez estudos de otimização do coletor de escape de um motor turboalimentado.

Mais recentemente, Van Gerpen e Shapiro [29] apresentaram uma cuidadosa e fundamentada análise de Segunda Lei para o processo de combustão de um motor de ignição por compressão. São destacados os efeitos da variação do início da combustão, da taxa de queima do combustível e da taxa de transmissão de calor sobre as irreversibilidades do processo. Alkidas [30] efetuou balanços globais de energia e exergia, para diferentes condições de operação de um motor diesel, a partir de valores obtidos experimentalmente para as quantidades de calor transferidas para a água de alimentação, para o óleo, para o aquecimento do coletor de escape e para o ambiente, a potência de eixo e a perda de energia nos gases de escape. Kumar et alii [31] utilizaram a definição de exergia de escoamento total e, a partir de um ciclo simulado para um motor diesel, obtiveram a distribuição das perdas e irreversibilidades globais para o motor, comparando-a com a distribuição de perdas fornecida por uma análise de Primeira Lei e com o trabalho de Primus [25].

Espera-se que a análise exergética venha a ser cada vez mais empregada, tanto em estudos de balanços globais como acoplada a programas de simulação de motores de combustão interna, devido às características que possui: a) é a melhor ferramenta para se avaliar as possibilidades reais de recuperação de perdas; b) pode ser um critério adicional para a otimização de processos internos ao motor; c) pode ser um critério de escolha entre diferentes propostas de modelos para a simulação de processos.

Este trabalho tem por objetivos: a) a criação de um modelo de simulação de um motor de ignição por centelha que incorpore a duração finita da combustão, a transmissão de calor dos gases para as paredes do cilindro, os efeitos de variação de proprieda-

des termodinâmicas e da composição do fluido de trabalho, bem como os processos de admissão e exaustão; b) elaboração de sub-rotinas de cálculo de propriedades termodinâmicas que incluam a exergia; c) efetuar a análise exergética global e dos processos internos para motores a gasolina e a álcool e comparar os dois motores do ponto de vista exergético.

No capítulo 2 é feita uma revisão dos conceitos associados à análise exergética, tais como geração de entropia, exergia, exergia química, escolha do estado de referência e eficiência exergética. Os fundamentos termodinâmicos e os procedimentos empregados para montar as rotinas de cálculo de propriedades são descritos no capítulo 3. O modelo de simulação global de um motor de ignição por centelha é apresentado no capítulo 4, com a descrição detalhada de cada processo que compõe o ciclo de trabalho do motor: admissão, compressão, combustão, expansão, exaustão e transmissão de calor instantânea. Os resultados da análise exergética dos dois tipos de motores estudados - gasolina e álcool - estão mostrados e comentados no capítulo 5. As conclusões e observações finais encontram-se no capítulo 6.

CAPÍTULO 2

A ANÁLISE EXERGÉTICA DE PROCESSOS TERMODINÂMICOS

2.1 - INTRODUÇÃO

A crescente preocupação com a conservação de energia útil tem aumentado as exigências no projeto e otimização de processos e sistemas térmicos, bem como na busca de soluções economicamente viáveis para o aproveitamento da energia térmica contida em gases de escape ou outras formas de calor residual. Enquanto a energia era abundante e barata, houve pouca preocupação com a qualidade da energia empregada e sua utilização conveniente.

A energia se conserva quantitativamente mas não qualitativamente. O conceito de exergia (ou disponibilidade) considera e avalia a qualidade da energia e, portanto, é de grande valor na análise de sistemas e processos térmicos. Este conceito provém da análise combinada da Primeira e da Segunda Leis da Termodinâmica, como será mostrado adiante. Até hoje, a análise de Segunda Lei tem sido muito pouco usada no dia a dia do engenheiro. Townsend [32] advoga o emprego da análise exergética e comenta ironicamente que a forma de apresentação da Segunda Lei através do conceito de entropia tem se prestado basicamente para "aterrorizar alunos nos dias de prova". Diz ainda que o engenheiro comum "se pergunta se é realmente possível fazer algo de útil com este conceito". Na prática, a Segunda Lei é usada - de forma indireta - no cálculo do equilíbrio químico e na definição de eficiências isentrópicas para processos de compressão e de expansão. O conceito de exergia supera as dificuldades para o emprego da análise combinada das duas Leis da Termodinâmica e apresenta grandes vantagens ao acrescentar informações importantes sobre o processo que está sendo analisado.

Os conceitos de processos reversíveis e irreversíveis, definidos na Termodinâmica, são de suma importância. Todos os processos reais são, em alguma medida, irreversíveis. Aí reside a grande contribuição do conceito de exergia, pois a essência da Segunda Lei pode ser entendida como a destruição de exergia pelas irreversibilidades dos processos. Assim, quando se fala em "conservação de energia" deve-se pensar em "conservação de exergia", pois a energia se conserva sempre (Primeira Lei) mas a exergia pode ser destruída por irreversibilidades. A análise exergética é a ferramenta indicada para a avaliação de caminhos para uma melhor utilização da energia disponível, pois indica uma clara distinção entre perdas de energia para o ambiente e as irreversibilidades internas ao processo. Um bom exemplo da utilização da análise exergética é dado por uma termoeletrica. De acordo com a análise de Primeira Lei, as perdas de energia pelo condensador através da água de refrigeração são significativas, representando aproximadamente dois terços da energia fornecida à usina. A análise exergética, porém, mostra que praticamente não há perda de energia utilizável no condensador: a perda real ocorre na caldeira, onde se produz grande irreversibilidade associada à reação de combustão e a transmissão de calor com grandes diferenças de temperatura. Então, não é razoável tentar aproveitar a energia rejeitada no condensador, como a análise baseada exclusivamente no balanço de energia poderia indicar.

Vários têm sido os caminhos sugeridos para se obter uma melhor utilização da exergia: a utilização de combustíveis alternativos renováveis ou residuais (biomassa, resíduos agrícolas, lixo), o uso de fontes não convencionais de energia (solar, eólica, geotérmica) complementadas ou não por fontes tradicionais, o uso combinado de uma mesma fonte de energia para objetivos diferentes (co-geração de energia elétrica e vapor industrial, por exemplo), ciclos de potência em cascata (gases de escape de uma turbina a gás usados para fornecer calor a um ciclo a vapor), ou a mudança de parâmetros de projeto com base na redução de irreversibilidades de processos.

Como exemplos da aplicação do método de análise exergética podemos citar os trabalhos de Kotas [33-35], Bouchet [36] e

Horlock [37] sobre usinas termoelétricas, de Sciubba et alii [38] em instalações de ciclos combinados de turbinas a gás e a vapor, de Primus et alii [25-28] acerca de motores diesel, de Brzustowsky [39], Beretta et alii [40-41] sobre o processo de combustão e de Tribus [42] sobre a dessalinização da água do mar. Em particular, a análise exergetica é fundamental no estudo de processos criogênicos, tais como os encontrados nas referências [43-49], na otimização termodinâmica de trocadores de calor [50-52] e nos estudos termoeconômicos [53-55].

2.2 - HISTÓRICO

A Segunda Lei da Termodinâmica pôde ser enunciada após as observações feitas em 1824 por Sadi Carnot. Desde então os conceitos de energia disponível e energia dissipada têm sido utilizados, ora de forma implícita, ora explicitamente. Gibbs em 1873 e Kelvin em 1879 foram os primeiros autores a apresentar esses conceitos de forma clara. A análise combinada da Primeira e da Segunda Leis foram apresentadas já em 1889 por Gouy e em 1898 por Stodola.

Esses conceitos ressurgem na década de trinta com Darrieus; Keenan em 1931 introduz o conceito de estado inativo e define a eficiência de Segunda Lei para processos. Em 1956 Rant [56] cunha a palavra *exergie* para representar a energia disponível. Desde então varios autores têm divulgado os conceitos básicos associados à análise combinada de Primeira e Segunda Leis, à produção de entropia e à eficiência de Segunda Lei, dentre os quais podem ser citados os mencionados nas referências [57-70].

Embora esses conceitos venham sendo utilizados extensamente na Alemanha e na Europa Oriental desde há vários anos, é com a tomada de consciência ao nível mundial da necessidade de se preservar as fontes de energia disponível que tem aumentado a divulgação e o interesse acerca da análise exergetica.

2.3 - OS CONCEITOS DE GERAÇÃO DE ENTROPIA, EXERGIA E IRREVERSIBILIDADE

Uma das dificuldades que tem se apresentado ao se tratar da análise combinada de Primeira e Segunda Leis refere-se à nomenclatura utilizada. O termo Geração de Entropia também é conhecido como Produção de Entropia ou como Entropia Gerada. O conceito de Irreversibilidade é também conhecido como Dissipação, Trabalho Dissipado, Trabalho Perdido ou Destruição de Exergia. De forma geral, pode-se dizer que Exergia (Exergie), Disponibilidade (Availability), Energia utilizável (energie utilisable), Energia Disponível, Trabalho Útil Máximo, ou Essergia (Essergy = Essence of Energy) correspondem ao mesmo conceito. No Fourth International Symposium on the Second-Law Analysis of Thermal Systems, realizado em Roma de 25 a 29 de maio de 1987, foi padronizada a nomenclatura com a palavra exergia.

2.3.1 - Geração de Entropia

Uma das formas de se apresentar a segunda Lei da Termodinâmica para um sistema fechado é pela desigualdade de Clausius:

$$S_2 - S_1 \geq \int_1^2 \delta Q / T \quad (2.1)$$

Pode-se definir a geração de entropia (S_g) ao se transformar a desigualdade de Clausius em uma igualdade:

$$S_g = S_2 - S_1 - \int_1^2 \delta Q / T \quad (2.2)$$

A equação (2.2) indica que a entropia gerada é sempre positiva para os processos reais e nula para os processos chamados de reversíveis. A geração de entropia pode ser utilizada como uma forma de se avaliar o grau de irreversibilidade de um dado processo, pois quanto maior for S_g , mais longe estará tal processo de um processo reversível. Da mesma forma, o conceito acima apresentado pode comparar dois processos diferentes entre

os mesmos estados terminais, mostrando qual é " menos irreversível " ao indicar qual produz menor geração de entropia.

Analogamente, pode-se definir a taxa de geração de entropia para um volume de controle a partir da desigualdade de Clausius :

$$\dot{S}_g = dS/dt - \int_{V_c} \dot{Q} / T + \sum_e \dot{m}_e s_e - \sum_s \dot{m}_s s_s \geq 0 \quad (2.3)$$

A taxa de geração de entropia será positiva ou, no limite que corresponde ao processo reversível, nula.

Diversas são as fontes de geração de entropia - vale dizer, as causas de irreversibilidades nos processos : todas as espécies de atrito (atrito seco, atrito viscoso), expansão não resistida, estrangulamento de um escoamento, mistura de fluidos distintos (na temperatura, na pressão ou na composição), transferência de calor através de uma diferença finita de temperaturas, mudança de fase quando as condições iniciais não eram de equilíbrio, deformação anelástica de um sólido, histerese eletromagnética, efeito Joule em um condutor elétrico, reações químicas em condições de não equilíbrio, difusão de massa devida a diferenças de concentrações finitas, etc.

2.3.2 - Irreversibilidade e o Teorema de Gouy-Stodola

Define-se a Irreversibilidade de um processo (para um sistema que produza apenas trabalho) como a diferença entre o trabalho máximo, devido a um processo reversível entre esses estados, e o trabalho real desenvolvido no processo:

$$I = W_{\max} - W_{\text{real}} \quad (2.4)$$

No caso de um processo que consuma trabalho, a definição é inversa.

A Irreversibilidade (ou Trabalho Perdido) é sempre positiva. A relação entre a Irreversibilidade e a Geração de Entropia é dada pelo Teorema de Gouy-Stodola:

$$I = T_0 S_g \quad (2.5)$$

Segundo este teorema, a Irreversibilidade é diretamente proporcional à Geração de Entropia. A demonstração deste Teorema pode ser encontrada na referência [50].

Quando um sistema fechado operando ciclicamente está em comunicação com mais de um reservatório térmico, pode-se mostrar que a Irreversibilidade associada ao reservatório térmico j é dada por:

$$I_j = T_j S_g \quad (2.6)$$

onde T_j é a temperatura do reservatório térmico j e S_g é a entropia gerada. Assim, mostra-se que a Irreversibilidade é uma quantidade relativa que depende da escolha do reservatório de referência, enquanto a Geração de Entropia é única e independente do reservatório térmico escolhido. Pode-se então escrever:

$$I_j = I_o \left[T_j / T_o \right] \quad (2.7)$$

o que indica que para o mesmo sistema podem ser obtidos diferentes valores de Irreversibilidade. Uma vez que a Geração de Entropia não varia com a escolha do reservatório de referência, para se minimizar a irreversibilidade dos sistemas de engenharia deve-se minimizar a Geração de Entropia .

2.3.3. - O conceito de Exergia

Exergia é a quantidade de trabalho que pode ser obtida quando uma certa porção de matéria é trazida ao estado de equilíbrio termodinâmico com os componentes usuais do meio ambiente, por meio de um processo reversível, envolvendo interações apenas com os componentes da natureza acima mencionados [71]. Esta é a definição de exergia em seu sentido mais amplo, em que o equilíbrio termodinâmico considera não só o equilíbrio de pressão e de temperatura, mas também o equilíbrio químico com as substâncias que compõem o meio ambiente. A fim de evitar o possível mal-entendido que a exergia (definida como trabalho máximo) só fosse útil em problemas que envolvessem diretamente a produção ou o consumo de trabalho, Gaggioli [72-73] conceitua a exergia como " uma proprie

dade que mede a máxima capacidade que um objeto possui de causar mudanças, um potencial que existe porque a substância não está em equilíbrio estável". Pelo mesmo motivo, apresenta uma dedução da exergia sem utilizar o conceito de trabalho máximo.

É importante notar que a exergia não está sujeita a uma Lei de conservação como a energia: as irreversibilidades que podem surgir no processo real destroem pelo menos parte da exergia.

Rant, ao introduzir a palavra exergia, criou também o termo anergia para designar a parcela não disponível da energia, de tal modo que:

$$\text{ENERGIA} = \text{EXERGIA} + \text{ANERGIA} \quad (2.8)$$

Assim, a energia poderia ser entendida como uma parte "disponível" (a exergia) e em uma parte "não disponível" (a anergia). Essa sugestão é frequentemente criticada por alguns autores por comparar grandezas de natureza diferente como a energia e a exergia, uma vez que uma delas obedece a uma Lei de conservação e a outra não, uma é função do estado e a outra depende do estado e do meio ambiente, uma possui estado de referência arbitrário e a outra tem o estado de referência imposto pelo meio ambiente.

2.3.4 - A Exergia Termomecânica

Define-se Exergia Termomecânica - também conhecida como exergia física - como o trabalho máximo que pode ser obtido quando uma certa porção de matéria é trazida ao estado de equilíbrio de pressão e temperatura com o meio ambiente. Quando a pressão e a temperatura dessa porção de matéria são iguais à pressão e a temperatura do meio, diz-se que o sistema se encontra no Estado Inativo Restrito. Pela definição dada, quando o sistema se encontra no estado inativo restrito, sua exergia termomecânica é nula.

A exergia termomecânica é uma propriedade do sistema e do meio ambiente. Uma vez definido o sistema combinado, a exergia é uma propriedade - ou seja, o trabalho máximo que pode ser obtido ao se trazer o sistema para o estado inativo restrito independe do processo empregado. Para que o trabalho real seja igual ao

trabalho máximo, é necessário que os processos sejam reversíveis pois, como mencionado acima, a exergia não se conserva e pode ser destruída por irreversibilidades.

Seja o sistema combinado formado por um sistema fechado e pelo meio ambiente. Entre o sistema e o meio pode haver interações de calor e de trabalho mas apenas trabalho pode cruzar o sistema combinado. O volume total do sistema combinado é constante, embora o volume do sistema e do meio possam variar. A Figura 2.1 mostra de forma esquemática um sistema combinado.

Supondo que o sistema sofra um processo genérico e vá ao estado inativo restrito, o trabalho W_c do sistema combinado pode ser obtido pela primeira lei :

$$W_c = - \Delta E_c \quad (2.9)$$

A variação de energia do sistema combinado é a soma das variações de energia do sistema e do meio

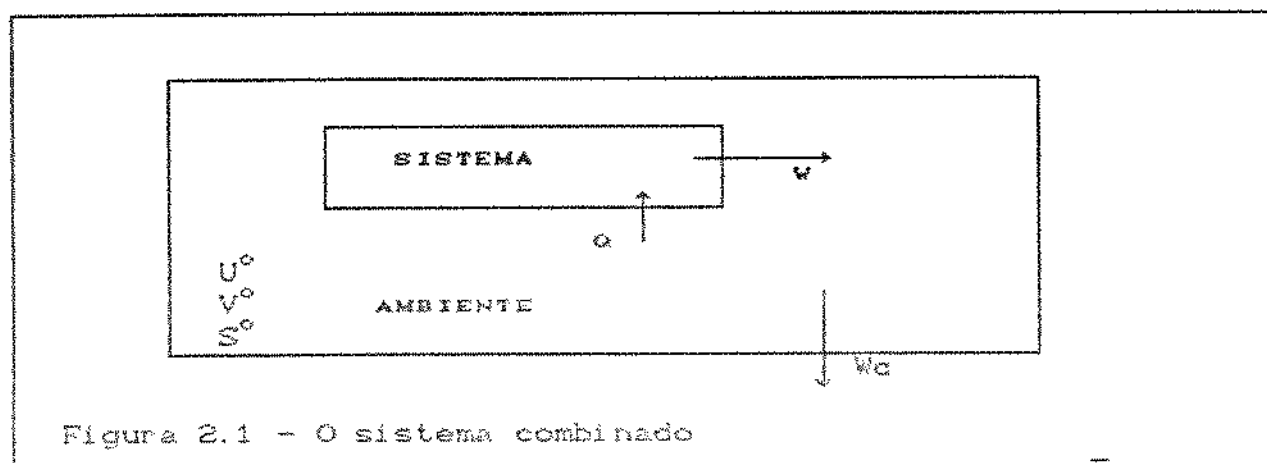
$$\Delta E_c = \Delta E_{sis} + \Delta E_{meio} \quad (2.10)$$

A variação de energia para o sistema é

$$\Delta E_{sis} = U_o - E \quad (2.11)$$

uma vez que no estado inativo as energias cinética e potencial serão nulas. Para o meio , a variação de energia interna (pois o meio não possui energia cinética ou potencial) pode ser obtida da expressão geral :

$$T_o \Delta S^o = \Delta U^o + P_o \Delta V^o \quad (2.12)$$



$$\Delta U^o = T_o \Delta S^o - P_o \Delta V^o \quad (2.13)$$

Substituindo as equações (2.10 a 2.13) em (2.9)

$$W_c = (E - U_o) + P_o \Delta V^o - T_o \Delta S^o \quad (2.14)$$

Uma vez que o volume do sistema combinado é fixo

$$\Delta V^o = - \Delta V = - (V_o - V) = V - V_o \quad (2.15)$$

Aplicando a segunda lei para o sistema combinado

$$\Delta S_c = S_g \quad (2.16)$$

$$\Delta S + \Delta S^o = S_g \quad (2.17)$$

$$\Delta S^o = S_g + (S - S_o) \quad (2.18)$$

então

$$W_c = (E - U_o) + P_o (V - V_o) - T_o (S - S_o) - T_o S_g \quad (2.19)$$

Como a geração de entropia é sempre positiva, o trabalho máximo que pode ser obtido do sistema combinado (ou seja, a exergia termomecânica do sistema) corresponde ao caso em que o processo é reversível :

$$Ex^{im} = (W_c)_{max} = (E - U_o) + P_o (V - V_o) - T_o (S - S_o) \quad (2.20)$$

A variação da exergia termomecânica pode ser obtida pela aplicação combinada da Primeira e da Segunda Leis da Termodinâmica para um sistema fechado:

$$dE = \delta Q - \delta W \quad (2.21)$$

$$dS = \delta Q / T + dS_g \quad (2.22)$$

Somando-se ($P_o dV$) à equação (2.21), multiplicando-se por T_o a (2.22) e subtraindo-se membro a membro as equações:

$$dE - T_o dS + P_o dV = (1 - T_o/T) \delta Q - (\delta W - P_o dV) - T_o dS_g \quad (2.23)$$

O termo do lado esquerdo da equação acima é definido como Exergia Termomecânica para um sistema fechado:

$$dEx^{tm} = dE - T_o dS + P_o dV \quad (2.24)$$

Integrando a equação (2.23) :

$$Ex_2^{tm} - Ex_1^{tm} = \int_1^2 (1 - T_o/T) \delta Q - \left[W - P_o(V_2 - V_1) \right] - I \quad (2.25)$$

A equação acima mostra que a variação da exergia termomecânica em um processo ocorre devido a transferências de exergia associadas às interações de calor e trabalho e da irreversibilidade produzida no processo. Deve ser observado que a exergia associada à transferência de calor é menor que o calor envolvido no processo por um fator que é exatamente a eficiência de um motor de Carnot que opera entre T e T_o.

A Exergia Termomecânica para um volume de controle pode ser obtida pelo mesmo procedimento usado para se deduzir a Primeira Lei para um volume de controle. Seja o volume de controle representado na Figura 2.2. No instante t o sistema é composto pela quantidade de massa dentro do volume mais a quantidade de massa que está hachurada. No instante t+dt, a massa dm já cruzou a fronteira e se encontra dentro do volume de controle. A equação da exergia para esse sistema é :

$$Ex^{tm}(t+dt) - Ex^{tm}(t) = (1 - T_o/T) \delta Q - (\delta W - P_o dV) - dI \quad (2.26)$$

O termo do trabalho possui duas contribuições - o trabalho do volume de controle e o trabalho requerido para introduzir o elemento de massa nesse volume de controle:

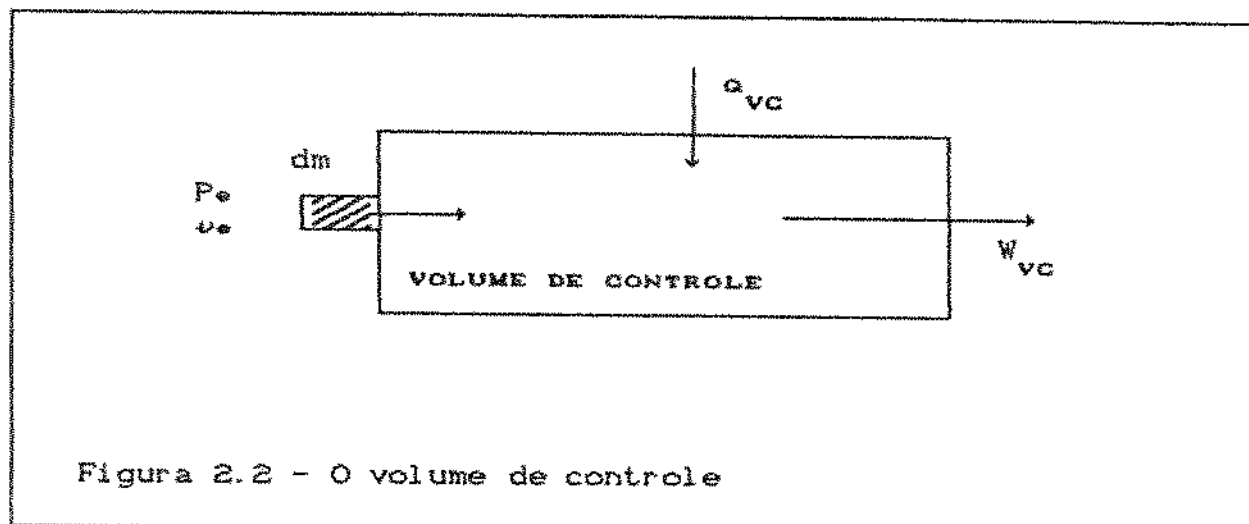
$$\delta W = \delta W_{vc} + (P_e v_e) dm \quad (2.27)$$

A variação de volume da massa total é :

$$dV = dV_{vc} - v_e dm \quad (2.28)$$

então

$$\begin{aligned} Ex^{tm}(t+dt) - Ex^{tm}(t) = & (1 - T_o/T) \delta Q - (\delta W_{vc} - P_o dV_{vc}) \\ & + (P_e v_e - P_o v_e) dm - dI \end{aligned} \quad (2.29)$$



No instante t a exergia associada à massa total é a do volume de controle somada à do elemento de massa dm

$$Ex^{tm}(t) = Ex_{vc}^{tm}(t) + ex_e^{tm} dm \quad (2.30)$$

onde ex_e^{tm} é a exergia específica associada ao elemento de massa. No instante $t+dt$ o sistema coincide com o volume de controle e então

$$Ex^{tm}(t+dt) = Ex_{vc}^{tm}(t+dt) \quad (2.31)$$

logo

$$dEx_{vc}^{tm} = (1 - T_o/T) \delta Q - (dW_{vc} - P_o dV_{vc}) + [ex_e + (P_e - P_o) v_e] dm - dI \quad (2.32)$$

onde

$$dEx_{vc}^{tm} = Ex_{vc}^{tm}(t+dt) - Ex_{vc}^{tm}(t) \quad (2.33)$$

A exergia termomecânica de escoamento (ex_f^{tm}) pode ser definida como a soma :

$$ex_f^{tm} = ex_e^{tm} + (P_e - P_o) v_e \quad (2.34)$$

como

$$ex_e^{tm} = (e_e - u_o) + P_o (v_e - v_o) - T_o (s_e - s_o) \quad (2.35)$$

e

$$e_e = u_e + C_e^2/2 + gZp_e \quad (2.36)$$

então

$$\text{exf}_e^{tm} = (h_e - h_o) - T_o (s_e - s_o) + C_e^2/2 + gZp_e \quad (2.37)$$

A equação (2.32) pode ser escrita como taxa de transferência de exergia para o volume de controle, supondo diversas entradas e saídas de massa e que a transferência de calor ocorre por toda a superfície de controle:

$$\begin{aligned} d\text{Ex}_{vc}^{tm}/dt = & \int_{sc} (1 - T_o/T) \dot{q} d\mathcal{A} - (\dot{W}_{vc} - P_o dV_{vc}/dt) \\ & + \sum_e \dot{m}_e \text{exf}_e^{tm} - \sum_s \dot{m}_s \text{exf}_s^{tm} - \dot{I} \end{aligned} \quad (2.38)$$

que, no caso de regime permanente, se reduz a

$$0 = \int_{sc} (1 - T_o/T) \dot{q} d\mathcal{A} - \dot{W}_{vc} + \sum_e \dot{m}_e \text{exf}_e^{tm} - \sum_s \dot{m}_s \text{exf}_s^{tm} - \dot{I} \quad (2.39)$$

Um cuidado especial deve ser tomado com a exergia de escoamento (exf), pois, embora a exergia de um sistema fechado (ex) seja sempre positiva ou nula, a exergia de escoamento pode assumir valores negativos desde que a pressão seja menor do que a pressão do estado inativo.

Na literatura é comum se definir a função disponibilidade Λ e a função disponibilidade de fluxo (Φ) como

$$\Lambda = u - T_o s + P_o v \quad (2.40)$$

$$\Phi = h - T_o s \quad (2.41)$$

e, dessa forma, a variação dessas funções correspondem, respectivamente, às variações da exergia termomecânica de um sistema e de um volume de controle entre dois estados genéricos.

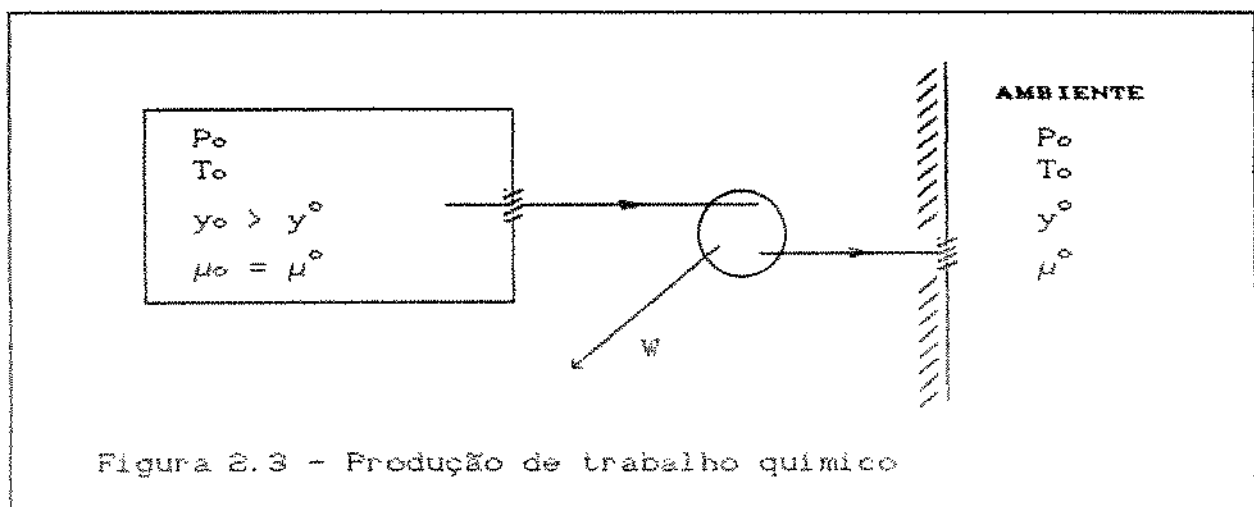
2.3.5 - A Exergia Termoquímica

Define-se Exergia Termoquímica - ou exergia total - como o trabalho máximo que pode ser obtido quando uma certa porção de matéria é trazida ao estado de equilíbrio mecânico (de pressão), térmico (de temperatura) e químico com o meio ambiente. Nesta situação, diz-se que o sistema encontra-se no Estado Inativo Irrestrito. Mesmo quando ocorre o equilíbrio de pressão e temperatura entre o sistema e o meio, ainda é teoricamente possível se obter mais trabalho devido ao não equilíbrio químico entre as substâncias que compõem o sistema e as que compõem o ambiente. A Figura 2.3 mostra uma forma de se obter teoricamente esse trabalho.

Na figura é mostrada uma membrana semi-permeável, pela qual a substância escoar entre o sistema e o ambiente. A existência real de membranas semi-permeáveis é de menor importância, uma vez que ao menos teoricamente é possível supor sua existência.

Rigorosamente, há dois tipos de trabalho químico possíveis: a) devido a diferenças de concentrações entre as substâncias do sistema e as do ambiente e b) devido a reações químicas entre as substâncias. Será inicialmente apresentado o primeiro deles.

Seja o sistema combinado mostrado na Figura 2.4, semelhante ao utilizado na dedução da exergia termomecânica mas que agora permite a passagem de massa entre o sistema e o ambiente através



de membranas semi-permeáveis. Entre o sistema e o ambiente podem ocorrer interações de calor ou de trabalho mas apenas trabalho pode cruzar o sistema combinado. O volume total do sistema combinado é constante, embora os volumes do sistema e do ambiente possam variar. Todas as substâncias que compõem o sistema também existem no ambiente - esta restrição será posteriormente relaxada ao se analisar o segundo tipo de trabalho químico, proveniente de reações químicas.

Supondo que o sistema sofra um processo genérico e vá ao estado inativo (irrestrito), o trabalho do sistema combinado pode ser obtido pela primeira Lei :

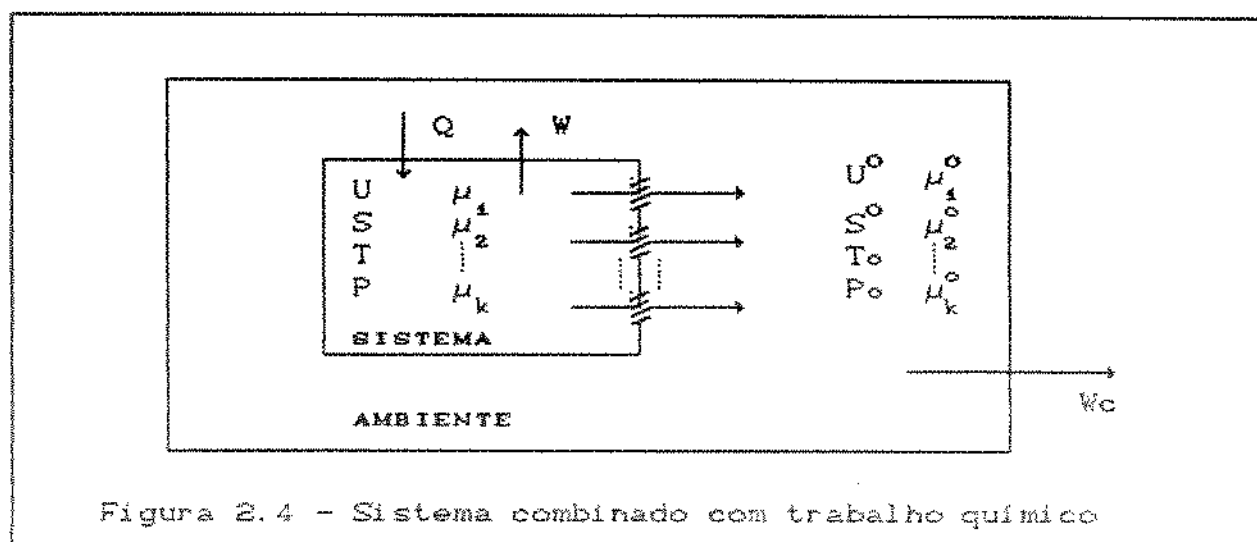
$$W_c = - \Delta E_c \quad (2.42)$$

Da equação fundamental da termodinâmica para sistemas compostos, a energia interna pode ser escrita como uma função do número de moles de cada substância presente, bem como da entropia e do volume :

$$U = U(S, V, n_1, n_2, \dots, n_n) \quad (2.43)$$

onde n_k é o número de moles da substância k . Pode-se então mostrar [74-75] que

$$U = T S - P V + \sum_k n_k \mu_k \quad (2.44)$$



onde μ_k é o potencial químico da substância k. Então:

$$U^o = T_o S^o - P_o V^o + \sum_k n_k \mu_k^o \quad (2.45)$$

$$U_c = T_o S_c - P_o V_c + \sum_k n_{c,k} \mu_k^o \quad (2.46)$$

mas

$$S_c = S^o + S + S_g \quad (2.47)$$

$$V_c = V^o + V \quad (2.48)$$

$$n_{c,k} = n_k^o + n_k \quad (2.49)$$

por outro lado

$$\Delta E_c = U_c - U^o - E \quad (2.50)$$

e então

$$\begin{aligned} W_c = - \left[T_o (S^o + S + S_g) - P_o (V^o + V) + \sum_k (n_k^o + n_k) \mu_k^o \right. \\ \left. - T_o S^o + P_o V^o - \sum_k n_k^o \mu_k^o - E \right] \end{aligned} \quad (2.51)$$

$$e \quad W_c = E + P_o V - T_o S - \sum_k n_k \mu_k^o - T_o S_g \quad (2.52)$$

como a geração de entropia é sempre positiva ou nula, o trabalho será máximo quando o processo for reversível - ou seja, a exergia será :

$$Ex = (W_c)_{\max} = E + P_o V - T_o S - \sum_k n_k \mu_k^o \quad (2.53)$$

Assim como foi definida a exergia termomecânica, pode ser também definida uma exergia química de tal forma que a exergia termoquímica (ou total) seja a soma das duas anteriores

$$Ex = Ex^{tm} + Ex^q \quad (2.54)$$

obtendo-se para Ex^q

$$Ex^q = E + P_o V - T_o S - \sum_k n_k \mu_k^o - \left[(E - U_o) + P_o (V - V_o) - T_o (S - S_o) \right] \quad (2.55)$$

como

$$U_o = T_o S_o - P_o V_o + \sum_k n_k \mu_{k_o} \quad (2.56)$$

então

$$Ex^q = \sum_k n_k (\mu_{k_o} - \mu_k^o) \quad (2.57)$$

e pode-se escrever a exergia termoquímica como

$$Ex = (E - U_o) + P_o (V - V_o) - T_o (S - S_o) + \sum_k n_k (\mu_{k_o} - \mu_k^o) \quad (2.58)$$

Para um processo qualquer ocorrendo em um volume de controle, a exergia de escoamento termoquímica pode ser dada por uma expressão semelhante à desenvolvida para a exergia termomecânica de escoamento (2.37):

$$exf = ex + (P - P_o) v \quad (2.59)$$

ou, substituindo-se ex pela equação (2.53) em base molar, e desprezando-se os termos de energia cinética e potencial:

$$exf = u + P_o v - T_o s - \sum_k y_k \mu_k^o + (P - P_o) v \quad (2.60)$$

ou

$$exf = h - T_o s - \sum_k y_k \mu_k^o \quad (2.61)$$

A exergia total de escoamento pode também ser escrita como a soma da exergia de escoamento termomecânica mais a exergia química:

$$exf = exf^{tm} + ex^q \quad (2.62)$$

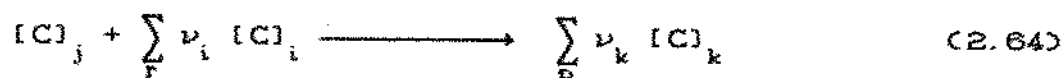
ou seja,

$$exf = (h - h_o) - T_o (s - s_o) + \sum_k y_k (\mu_{k_o} - \mu_k^o) \quad (2.63)$$

Até agora, a exergia termoquímica deveu-se a diferenças de

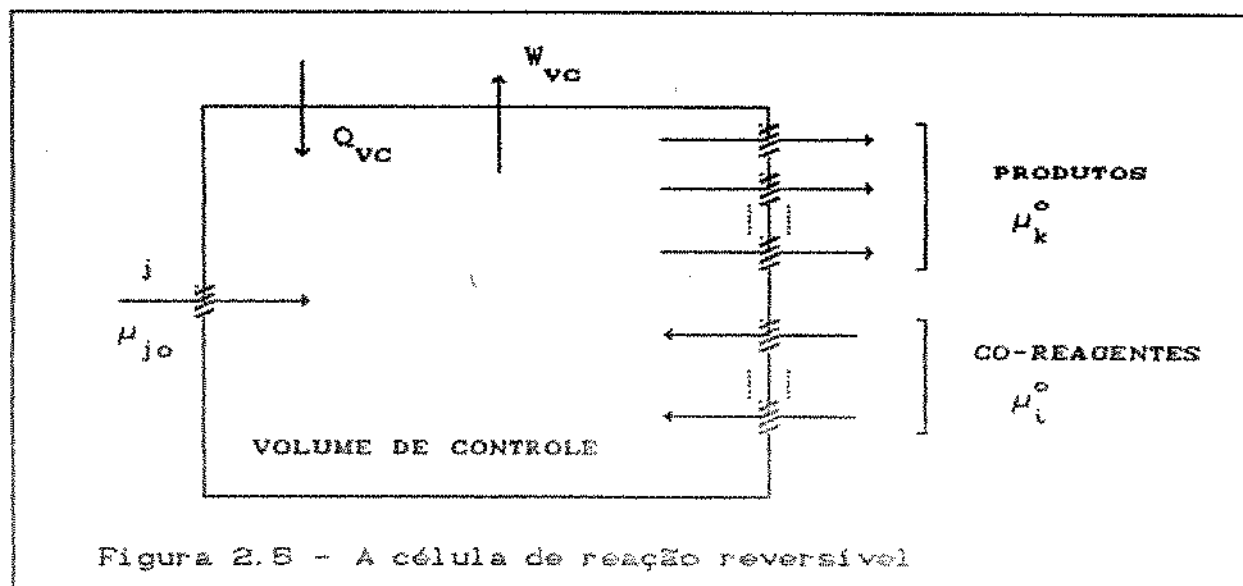
concentração de cada substância que compõe o sistema e o meio. Quando uma dada substância que faz parte da composição do sistema não é encontrada naturalmente no ambiente, não há esta contribuição. Todavia, a substância em questão pode reagir quimicamente e produzir substâncias que compõem o ambiente, e dessa reação pode-se obter trabalho - um exemplo claro disto é um combustível que se encontra no estado inativo restrito: ele pode ser queimado e fornecer trabalho. Para a dedução da contribuição em trabalho de reações químicas, considere-se a Figura 2.5 que mostra uma célula de reação reversível, na qual as espécies químicas entram e saem através de membranas semi-permeáveis.

Seja j a substância não presente no ambiente. A reação pode ser expressa, por mol da espécie química j :



onde $[C]_i$ representa cada co-reagente, $[C]_k$ cada produto e ν_i e ν_k são os coeficientes estequiométricos da reação. Em regime permanente a Primeira e a Segunda Leis aplicadas à reação resultam em

$$\bar{w} = \bar{q} + \bar{h}_{j0} + \sum_i \nu_i \bar{h}_i^o - \sum_k \nu_k \bar{h}_k^o \quad (2.65)$$



$$\bar{q} = T_0 \left(\sum_p \nu_k \bar{s}_k^0 - \sum_r \nu_i \bar{s}_i^0 - \bar{s}_{j_0} \right) \quad (2.66)$$

pois o processo é reversível, por definição. Assim:

$$\bar{w} = \bar{h}_{j_0} - T_0 \bar{s}_{j_0} + \sum_r \nu_i (\bar{h}_i^0 - T_0 \bar{s}_i^0) - \sum_p \nu_k (\bar{h}_k^0 - T_0 \bar{s}_k^0) \quad (2.67)$$

como

$$\bar{h} - T_0 \bar{s} = \mu \quad (2.68)$$

então

$$\bar{w} = \mu_{j_0} - \left(\sum_p \nu_k \mu_k^0 - \sum_r \nu_i \mu_i^0 \right) \quad (2.69)$$

Agora, uma vez que o processo de reação é reversível, o trabalho determinado é máximo e igual à exergia química da reação.

Todavia, a equação (2.58) continua sendo válida quando uma das k espécies químicas é um combustível (ou um composto não presente no ambiente) desde que, para essa substância:

$$\mu_j^0 = \sum_p \nu_p \mu_p^0 - \sum_r \nu_r \mu_r^0 \quad (2.70)$$

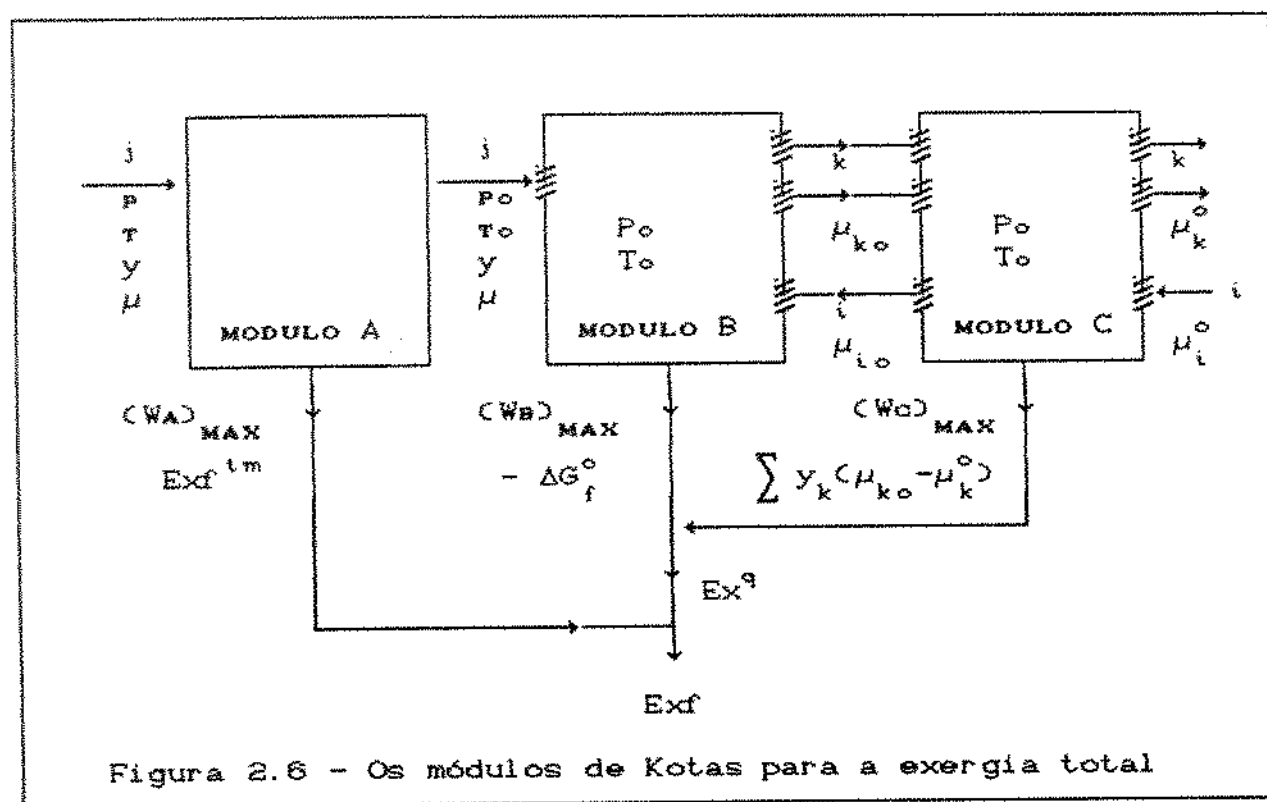
e os co-reagentes e produtos existam no ambiente.

Outros autores apresentam os mesmos resultados a partir de formulações um pouco diferentes da aqui desenvolvida. Kotas [33] (ver Figura 2.6) apresenta três módulos reversíveis de produção de trabalho, cada qual com uma função; um módulo leva os componentes do sistema ao estado inativo restrito, outro módulo promove a reação dos constituintes do sistema reduzindo-os aos componentes do ambiente, e um último produz trabalho a partir das diferenças de concentrações, através de membranas semi-permeáveis. A exergia total é obtida pela soma dos trabalhos desenvolvidos em cada módulo.

Quanto à nomenclatura, a exergia total de um sistema fechado é denominada "Exergia de Estagnação" por Kotas [33], "Exergia de Extração e Armazenamento" por Haywood [61], e de "Essergia" por Evans [59]. A exergia total de um volume de controle é denominada "Exergia de Extração e Entrega" por Haywood.

No caso das reações químicas, é conveniente ressaltar que a exergia obtida difere da variação da energia livre de Gibbs devi-

do ao trabalho adicional que pode ser obtido através das diferenças de concentrações entre os componentes do sistema e do ambiente. Frequentemente, porém, a energia livre de Gibbs e mesmo o poder calorífico de um dado combustível são utilizados como a exergia química dessa substância, uma vez que esses três conceitos na maioria das vezes possuem valores numéricos semelhantes.



2.4 - ESTADOS DE REFERENCIA - EXERGIA QUÍMICA PADRÃO

Uma das dificuldades para o emprego em maior escala do conceito de exergia nas avaliações termodinâmicas reside no fato que a exergia não é uma propriedade do sistema e sim do sistema combinado (sistema mais ambiente). O ambiente é o limite para onde tendem os sistemas termodinâmicos em processos espontâneos: quando um sistema atinge o estado de equilíbrio com o ambiente, não mais possui capacidade de produzir trabalho - isto é, não mais possui exergia.

Quando se trata de avaliar diferenças de exergia termomecâ-

nica, a caracterização do estado inativo pode se dar exclusivamente a partir da pressão e temperatura do ambiente. Todavia, quando se pretende obter a exergia de sistemas reagentes ou quando se calculam eficiências de Segunda Lei (ver adiante) mesmo quando o fluido de trabalho está em circuito fechado, é necessário adotar como estado de referência o Estado Inativo Irrestrito, no qual a composição do ambiente deve ser conhecida. Como o ambiente não está em equilíbrio químico, a exergia, rigorosamente, varia sempre que muda a composição do meio. Além da questão da composição química também as condições de pressão e temperatura variam no ambiente ao longo de um dia ou de um ano. Alguns autores trabalham com um valor padrão de temperatura e pressão, outros utilizam os valores instantâneos, enquanto outros sugerem que se obtenham valores médios. Em um estudo recente, Rosen e Scott [76] avaliaram a sensibilidade da exergia termomecânica do vapor de água a variações de pressão e temperatura ambientes, constatando que o efeito da pressão de referência é praticamente desprezível. Todavia, a variação de temperatura de referência pode acarretar variações ponderáveis na exergia (por exemplo, para uma variação de 15°C na temperatura de referência, pode-se ter variações de 4 a 20 % na exergia, dependendo do estado do vapor). Assim, a dificuldade para se estabelecer o estado de referência reside na dificuldade em se tratar com o estado do ambiente.

Várias têm sido as abordagens para a escolha do estado de referência. Denbigh [77] sugere o mais simples - tomar como referência a pressão e a temperatura do ambiente, ou seja, o estado inativo restrito. Com essa formulação, apenas diferenças de exergia termomecânicas podem ser obtidas sem que se incorra em erros. Primus et al. [25], ao analisar motores diesel pela Segunda Lei, sugerem como estado de referência apenas a pressão ambiente, uma vez que os motores a pistão e as turbinas são máquinas que produzem trabalho a partir de expansões; eles justificam que, do ponto de vista de máquinas veiculares, as altas temperaturas encontradas no escape não são disponíveis na prática, assim como não o é também a exergia de extração. Como temperatura de referência, assumem a temperatura resultante de um processo isentrópico de expansão entre a pressão instantânea e a pressão atmosférica. Tal

procedimento, baseado em considerações pragmáticas quanto ao que é ou não possível de se aproveitar da exergia, torna impossível calcular eficiências de segunda lei e dificulta a comparação nas mesmas bases de seu trabalho com outros trabalhos análogos.

Uma abordagem mais antiga quanto ao estado de referência pode ser encontrada nos trabalhos de Keenan [78] e Obert [79]. Eles assumem que o estado de referência é constituído pela temperatura e pressão do ambiente mas desconsideram a exergia de extração. Dessa forma, a exergia dos combustíveis passa a ser a variação da energia livre de Gibbs para a reação de combustão. Apesar de ser o método que mais se aproxima das possibilidades práticas de utilização da exergia, apresenta valores errôneos para eficiências de Segunda Lei.

Dentre os métodos que utilizam como estado de referência o Estado Inativo Irrestrito, pode-se identificar duas abordagens distintas: os Estados Inativos Irrestritos definidos para cada situação particular e o Estado Inativo Irrestrito padrão, válido para qualquer caso.

Um grupo de pesquisadores, em especial nos EUA, considera a exergia de extração mas define o ambiente de referência para cada caso particular. De acordo com as substâncias presentes no sistema a analisar, escolhem-se as substâncias do ambiente que sejam relevantes. Todas as espécies presentes no sistema devem poder ser formadas quimicamente a partir dos constituintes do ambiente; os constituintes do meio são escolhidos em sua forma mais abundante, a fim de se obter sua concentração de maneira precisa. Esta é a abordagem usada por Wepfer e Gaggioli [80], Tribus *et alii* [42], Evans [59], Moran [66] e Reistad [60].

Como exemplo desta abordagem, seja o caso em que o ambiente é modelado como uma mistura de gases ideais, com a composição dada na Tabela 2.1:

Tabela 2.1 - Composição do ar ambiente

	N_2	O_2	H_2O	Ar	CO_2	H_2
fração molar	0,7560	0,2034	0,0311	0,0091	0,0003	0,0001

Pela equação (2.57) e usando-se as relações válidas para gases ideais:

$$\begin{aligned}
 Ex^q &= \sum y_k (\mu_{k0} - \mu_k^o) \\
 &= \sum y_k \left[\bar{h}(T_0) - T_0 \bar{s}(T_0, y P_0) - \bar{h}(T_0) + T_0 \bar{s}(T_0, y^o P_0) \right] \\
 &= \sum y_k \left[- T_0 (\bar{s}(T_0, y P_0) - \bar{s}(T_0, y^o P_0)) \right] \\
 &= \sum y_k \left[T_0 \bar{R} \ln(y / y^o) \right] \quad (2.71)
 \end{aligned}$$

Dessa maneira, a exergia química de um gás ou de uma mistura de gases pode ser determinada facilmente. Por exemplo, a exergia química do oxigênio puro a 298,15 K e a uma atmosfera será:

$$\overline{ex}^q (O_2) = (298,15)(8,314) \ln(1/0,2034) = 3947 \text{ KJ/Kgmol}$$

Esta metodologia é bastante atraente quando se trata de analisar problemas que envolvem apenas as substâncias de referência mais comuns e encontradas na atmosfera (gás carbônico, água, oxigênio, nitrogênio, etc). Todavia, quando outros elementos precisam ser considerados, a escolha das substâncias de referência e o cálculo da exergia química podem se tornar bastante difíceis. Por exemplo, para poder considerar o enxofre presente no carvão, Gaggioli [81] teve que introduzir o carbonato de cálcio e o gesso ($CaSO_4 \cdot 2H_2O$) como componentes do sistema de referência, uma vez que a quantidade dessas substâncias, do oxigênio e do gás carbônico é afetada pela absorção na atmosfera do enxofre presente nos gases de combustão.

Sussman [82], usando valores de entropia padrão a 25°C e uma atmosfera e de entalpia de formação, define uma exergia química padrão com H_2O , CO_2 , N_2 e O_2 como substâncias de referência. Ele mostra que para processos em regime permanente apenas a temperatura de referência é necessária, uma vez que se trabalhe apenas com variações de exergia de escoamento.

Szargut e colaboradores [71,83,84] adotam um ambiente padrão, com temperatura, pressão e composição química fixas. Dessa forma todos os problemas podem ser analisados a partir de um único estado de referência, embora esse estado possa não coin-

cidir com o ambiente real onde se encontra o sistema. O método consiste em associar a cada elemento químico uma substância de referência, com concentração igual à sua concentração no ambiente terrestre. As substâncias de referência são buscadas entre os componentes gasosos da atmosfera, entre os compostos iônicos mono ou bivalentes do oceano e entre compostos moleculares do mar e da crosta terrestre, nessa ordem de prioridade. Tanto para os gases como para os compostos moleculares é admitido o modelo de solução ideal, que é uma boa aproximação apenas para os gases. Para os componentes iônicos do oceano, são utilizados os coeficientes de atividade de íons, dentro dos limites da Lei de Debye-Huckel. Os detalhes do cálculo da exergia química padrão para os elementos químicos podem ser encontrados nas referências [83,84].

Apesar da metodologia usada por Szargut e colaboradores ser complexa, a utilização dos valores por eles tabelados é simples; para um composto genérico, sua exergia química padrão é dada por:

$$\overline{ex}_{st}^q = \Delta G_f^\circ + \sum \nu_{el} \overline{ex}_{el} \quad (2.72)$$

onde ΔG_f° é a energia livre de Gibbs de formação da substância, ν_{el} é o número de átomos de um dado elemento do composto e $\overline{ex}_{el}$ é a exergia molar standard para o elemento químico - tabelada para 49 elementos. Os compostos mais comuns têm exergia baixa e as substâncias mais raras possuem exergia tanto maior quanto mais raras forem, o que acaba por se constituir em um índice de seu próprio valor econômico ou da perturbação ambiental causada quando são emitidas para o ambiente.

Quando a temperatura do Estado Inativo Irrestrito (T_0) for diferente da temperatura de referência (298,15 K) para a exergia standard, pode ser introduzida a seguinte correção [35]:

$$ex^q = \overline{ex}_{st}^q (T_0 / 298,15) - \Delta H^\circ \left[(298,15 - T_0) / 298,15 \right] \quad (2.73)$$

onde ΔH° é a entalpia de reação no estado de referência (298,15K)

Ahrendts [85] propôs um estado de referência em que os constituintes do ambiente, suposto um sistema isolado, são trazidos inicialmente à condição de equilíbrio químico, tanto na atmosfera

quanto na crosta terrestre e no mar. Essa sugestão provém do fato de que o ambiente não está em equilíbrio químico, devido a influências externas (o Sol, principalmente) e o cálculo da exergia química de algumas substâncias pode resultar em valores negativos pelos métodos anteriormente descritos. A profundidade de crosta terrestre considerada para efeito do cálculo do equilíbrio químico é importante e pode alterar bastante a composição final - para uma espessura de crosta de mil metros de profundidade, o equilíbrio químico imposto faz com que surja um ambiente de referência bastante estranho: na atmosfera quase não há oxigênio e aparecem em quantidades ponderáveis o metano e a amônia; esse ambiente obtido faz com que a exergia do gás oxigênio seja maior do que a do metano! O autor sugere então que seja utilizada a espessura de um metro de crosta, o que conduz a resultados que não deterioram a visão intuitiva de exergia. Baher [85] emprega uma metodologia semelhante, mas considera a inibição na formação de nitratos (equilíbrio químico restrito) e uma profundidade de crosta terrestre de um metro.

Uma abordagem que combina os métodos de Gaggioli e Szargut é apresentada por Kameyama *et alii* [86]. Da equação (2.72) proposta por Szargut e reescrita para um composto genérico $Z_zX_xY_y$ se obtém:

$$\overline{ex}_{el}(Z) = \left(\overline{ex}_{st}(Z_zX_xY_y) - x \overline{ex}_{el}(X) - y \overline{ex}_{el}(Y) - \Delta \bar{G}_f^0 \right) / z \quad (2.74)$$

Se a substância $Z_zX_xY_y$ for uma substância de referência, sua exergia será nula; se as exergias dos elementos X e Y forem conhecidas, então pode-se determinar a exergia do elemento Z. Isto conduz a um método sequencial para o cálculo das exergias padrão dos elementos. Os autores, com tal procedimento, tabelaram a exergia padrão molar de 79 elementos químicos. Para a elaboração dessa tabela, surgem dois problemas: a ordenação dos elementos químicos - qual calcular primeiro - e a escolha da substância de referência para cada elemento. O primeiro problema foi solucionado tomando o oxigênio, nitrogênio, carbono e hidrogênio para iniciar a sequência e manter os valores da exergia dos combustíveis consistentes com os dos demais autores. O número de

Clark - que mede a abundância relativa dos elementos na natureza - foi adotado como critério de ordenação para os demais elementos. A substância de referência de um dado elemento é aquela - dentre todas as que contém esse elemento e outros elementos já calculados - que fornece o maior valor de $\overline{ex}_{el}(Z)$. Este método utiliza as concentrações dos elementos na atmosfera, na água do mar e na litosfera apenas para determinar a ordem sequencial dos elementos. Dessa forma, as simplificações assumidas por Szargut para determinar a atividade química dos minerais são evitadas.

A Tabela 2.2 mostra os valores da exergia calculados segundo os diferentes métodos apresentados. Uma primeira constatação é que os valores obtidos são compatíveis entre si; particularmente para combustíveis, cujo valor de exergia é alto, as diferenças tornam-se bastante pequenas. Outra observação importante é que, em todos os métodos apresentados, algumas substâncias apresentam valores de exergia negativos. Este é o caso para alguns nitratos e expressa o fato que o ambiente não está em equilíbrio químico.

Tabela 2.2 - Exergia química para algumas substâncias

($T_0 = 298,15$ K, $P_0 = 1$ atm, ex^q em kJ/gmol)

substância	Gaggioli ref. [55]	Szargut ref. [57]	Ahrendts ref. [58]	Kameyama ref. [59]
O ₂	3,947	3,973	3,951	3,936
N ₂	0,691	0,718	0,639	0,670
CO ₂	20,108	20,189	14,174	20,138
H ₂ O g	8,668	11,758	8,636	8,625
H ₂ O l	0	3,168	0,045	0
CH ₄	830	836,5	824	831
C ₇ H ₁₆	4757	4783	4716	4766
CH ₃ OH l	717	723	711	717,2
NaNO ₃	----	-15,74	-18	0
Ca(NO ₃) ₂	-18	-11,97	-8	-4,1

Valores negativos de exergia indicam que a formação desses nitratos é espontânea, embora essas reações sejam bloqueadas cineticamente.

Um problema prático surge quando se necessita avaliar a exergia de misturas de substâncias. Para misturas mecânicas - ou seja, misturas nas quais o processo de mistura não afeta consideravelmente a entropia - pode ser usada uma simples média ponderada entre os valores de exergia química dos componentes da mistura. Eventuais impurezas presentes em um combustível podem também ser tratadas da mesma maneira. Para gases e líquidos, essa aproximação é por demasiado grosseira, embora para gases ideais o cálculo correto seja bastante simples.

Para os combustíveis comerciais - cuja composição química é geralmente desconhecida ou bastante variável - Szargut e Styrylska [87] obtiveram correlações empíricas entre a exergia química e o poder calorífico para combustíveis sólidos, líquidos e gasosos em função da relação molar existente entre seus elementos componentes e o número de átomos de carbono. Essas correlações podem ser empregadas ao menos como uma primeira aproximação e foram sumariadas por Rodriguez [88].

2.5 - EFICIÊNCIA EXERGÉTICA

É conveniente utilizar o conceito de eficiência exergética para avaliar a conversão de exergia em um processo, da mesma maneira que se usa o conceito de eficiência (de Primeira Lei) para avaliar conversões de energia. Este conceito, ao avaliar qualitativa e quantitativamente a conversão de exergia, diferencia as perdas para o ambiente das irreversibilidades internas e pode se constituir em um poderoso indicador do desempenho de processos ou sistemas. Existem conversões de energia que são profundamente destruidoras de exergia; embora uma análise energética indique que um aquecedor elétrico de água é altamente eficiente na conversão de energia, a eficiência exergética mostra que ele é pouco eficiente na conversão da exergia. Assim, uma forma de se conservar exergia consiste em proporcionar uma adequação em termos de qualidade da energia, entre a fonte de energia emprega-

da e a utilização - ou seja, para uma utilização em que a exergia requerida é baixa, deve ser evitado o uso de uma fonte de energia com alta exergia. Na literatura, a Eficiência Exergética pode ser encontrada com diferentes nomes: Eficiência de Segunda Lei, Eficiência Racional, Eficiência Termodinâmica Relativa ou Efetividade.

Vários tipos de expressões para a eficiência exergética podem ser encontrados na literatura. As duas definições mais empregadas são:

$$\epsilon = \frac{\text{exergia útil produzida}}{\text{consumo de exergia}} \quad (2.75)$$

$$\epsilon' = \frac{\text{exergia de saída}}{\text{exergia de entrada}} \quad (2.76)$$

Apesar de serem expressões formalmente simples, é necessário cuidado ao se comparar valores calculados de acordo com as diferentes definições. Obviamente, a utilização de (ϵ') é restrita a processos em regime permanente, enquanto que (ϵ) pode ser aplicada a processos em regime permanente ou a sistemas fechados.

Para se obter uma expressão geral para a eficiência exergética da eq.(2.76), pode-se realizar um balanço de exergia para um volume de controle em regime permanente, tal como o indicado na Figura 2.7:

$$\begin{aligned} \dot{Ex}_m + \dot{Ex}_c + \Delta \dot{Ex}_n + \dot{Q}_n \left(\frac{T_n - T_o}{T_n} \right) + \dot{W}_n &= \\ = \dot{Ex}_u + \dot{Ex}_d + \Delta \dot{Ex}_u + \dot{Q}_u \left(\frac{T_u - T_o}{T_u} \right) + \dot{W}_u + \dot{I} \end{aligned} \quad (2.77)$$

onde $\dot{Ex}_m$ - fluxo de exergia das matérias primas não energéticas
 $\dot{Ex}_c$ - fluxo de exergia das substâncias de alimentação com finalidades energéticas (combustíveis e oxidantes)
 $\Delta \dot{Ex}_n$ - variação da exergia de uma corrente de fluido necessária ao processo, que atravessa o volume de controle sem reagir quimicamente.
 $\dot{Q}_n (T_n - T_o) / T_n$ - exergia associada a uma transferência de calor (necessária) com uma fonte térmica externa à temperatura T_n

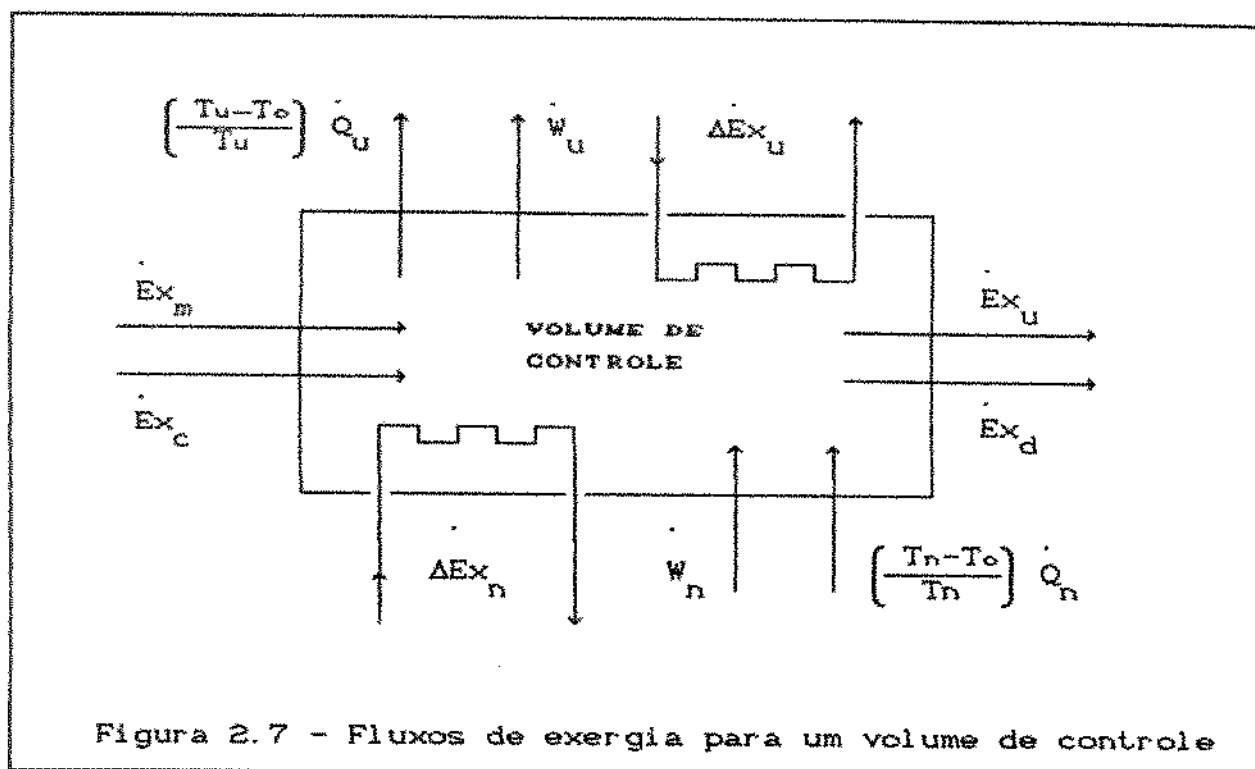


Figura 2.7 - Fluxos de exergia para um volume de controle

- $\dot{W}_n$ - potência líquida consumida pelo processo
- $\dot{Ex}_u$ - fluxo de exergia de produtos úteis
- $\dot{Ex}_d$ - fluxo de exergia dos produtos residuais descartados
- $\Delta \dot{Ex}_u$ - variação de exergia de uma corrente útil, que atravessa o volume de controle sem reagir quimicamente
- $\dot{Q}_u (T_u - T_o) / T_u$ - exergia associada a uma transferência de calor (útil) com uma fonte térmica externa à temperatura T_u
- $\dot{W}_u$ - potência líquida útil produzida pelo processo
- I - irreversibilidades internas ao volume de controle

A partir do balanço de exergia acima, a eficiência exergética (ϵ) pode ser expressa por:

$$\epsilon = \frac{(\dot{Ex}_u - \dot{Ex}_m) + \Delta \dot{Ex}_u + \left[\dot{Q}_u (T_u - T_o) / T_u \right] + \dot{W}_u}{\dot{Ex}_c + \Delta \dot{Ex}_n + \left[\dot{Q}_n (T_n - T_o) / T_n \right] + \dot{W}_n} \quad (2.78)$$

Para aplicar esta expressão a um problema particular, os termos inexistentes devem ser abandonados. Apesar de ter sido

apresentada para um volume de controle, a expressão acima pode ser empregada para sistemas fechados desde que a exergia de escoamento seja substituída pela exergia de estagnação e as variações de exergia que cruzam o volume de controle sejam substituídas pelas variações entre os estados inicial e final:

$$\epsilon = \frac{\Delta Ex_u + \left[Q_u (T_u - T_o) / T_u \right] + W_u}{\Delta Ex_n + \left[Q_n (T_n - T_o) / T_n \right] + W_n} \quad (2.79)$$

sendo que as eventuais reações químicas presentes serão tratadas dentro das variações de exergia de estagnação.

A definição da eficiência exergética da eq.(2.76) é precisa e não deixa margem a dúvidas. Embora este tipo de eficiência exergética seja usado para avaliar problemas em geral, Reistad [60] mostrou que: a) ϵ' pode ser numericamente insensível ao processo; b) ϵ' mede apenas o desempenho termodinâmico do processo e não se o objetivo do processo está sendo atingido; c) ϵ é uma medida do desempenho termodinâmico relativo ao objetivo do processo; d) ϵ não dá base a comparações para processos puramente dissipativos pois nesses casos é sempre zero. Assim, o uso da eficiência exergética (ϵ') é recomendado apenas para processos puramente dissipativos - como estrangulamentos, escoamento de Fanno, tubo de Venturi, etc.

Existem casos em que os resultados da eficiência de Primeira Lei e da eficiência exergética são muito próximas e casos em que são profundamente diferentes. A Tabela 2.3 mostra os valores de ambas para alguns processos e sistemas de interesse.

Deve-se observar que a eficiência exergética é sempre menor que a unidade, mesmo para refrigeradores e bombas de calor. Para ciclos de potência a eficiência exergética é muito próxima da eficiência de Primeira Lei. Para alguns equipamentos, tais como caldeiras, queimadores e aquecedores elétricos de água, as eficiências exergéticas e de Primeira Lei são bastante diferentes, ressaltando o papel da análise exergética no entendimento do processo de degradação de energia.

Tabela 2.3 - Comparação entre as eficiências exergética (ϵ) e de Primeira Lei (η)

SISTEMA	η	ϵ
Termoelétrica a carvão (200 MW)	0,41	0,40
Planta de co-geração (10 MW)	0,75	0,33
Motor Diesel (20000 HP)	0,40	0,40
Turbina a gas (25 MW)	0,30	0,30
Caldeira de grande porte	0,90	0,50
Ar condicionado (COP 2,5)	----	0,17
Fogão doméstico a gas	0,60	0,10
Aquecedor elétrico de água	0,93	0,08
Refrigerador elétrico (COP 0,9)	----	0,10
Turbina a vapor (50 MW)	0,90	0,85
Motor elétrico (5 HP)	0,70	0,70
Bomba de calor elétrica (COP 3,5)	----	0,60

2.6 - RECOMENDAÇÕES

Na otimização do desempenho de um dado processo, a identificação das irreversibilidades internas pode ser obtida simplesmente através do cálculo da entropia gerada ou por balanço de exergia, sem maiores preocupações com a identificação rigorosa do estado de referência. Todavia, para se calcular eficiências exergéticas - que permitem a comparação de diferentes processos - a escolha do estado de referência apropriado é fundamental. O mesmo é verdade para estudos termoeconômicos e para avaliação e controle de poluição ambiental baseados no conceito de exergia.

Uma vez que a Terra não é um sistema isolado e o ambiente não está em equilíbrio, não é possível se definir um ambiente de referência "teoricamente correto". Cada um dos métodos acima

apresentados possui vantagens e limitações. Métodos baseados no Estado Inativo Restrito, ou em estados de referência especiais como o de Primus [25] e o de Sussman [82] devem ser evitados, uma vez que não se prestam para cálculos de eficiências exergeticas e tornam impossível a comparação com outros trabalhos semelhantes.

Considerando a simplicidade de utilização e generalidade, os métodos que definem um estado de referência padrão, particularmente os das referências [35,71,84,86] são preferidos. A escolha de um estado de referência específico para o problema a ser analisado, como nas referências [42,54,59,60,66], também é uma metodologia interessante mas seu emprego pode ser bastante difícil, dependendo das espécies químicas que estiverem presentes.

Uma versão reduzida deste capítulo foi traduzida para o inglês e publicada na revista Energy com o título "Choice of a reference state for exergetic analysis" [89]. Nesse artigo, após uma breve apresentação do conceito de exergia, são discutidos os vários métodos de escolha do Estado Inativo Irrestrito e as várias definições de eficiência exergetica.

CAPÍTULO 3

CÁLCULO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS

3.1 - INTRODUÇÃO

Um dos maiores problemas para a simulação dos processos internos em motores de combustão interna consiste no cálculo de propriedades termodinâmicas e na determinação da composição química do fluido de trabalho a cada instante. Desde o trabalho clássico de Hershey e colaboradores [90], vários autores [91-94] têm proposto métodos para a determinação das propriedades termodinâmicas a partir da hipótese de equilíbrio químico entre as espécies.

Para a determinação de propriedades termodinâmicas algumas hipóteses devem ser assumidas a priori: quais as substâncias a considerar, se será adotado equilíbrio químico ou não, se será considerada a dissociação em altas temperaturas, qual a equação de estado a ser empregada.

Neste trabalho, assume-se que o fluido de trabalho pode ser constituído das seguintes substâncias: nitrogênio (N_2), oxigênio (O_2), gás carbônico (CO_2), água (H_2O), monóxido de carbono (CO), hidrogênio (H_2), hidroxila (OH), óxido de nitrogênio (NO), nitrogênio atômico (N), oxigênio atômico (O), hidrogênio atômico (H), argônio (Ar) e um combustível do tipo $C_nH_mO_r$, que pode ser um hidrocarboneto puro, um álcool ou uma aproximação de um combustível comercial como a gasolina ou o óleo diesel. A escolha de tais substâncias se prende à necessidade de se prever a dissociação em altas temperaturas - que são atingidas em motores de ignição por centelha - bem como para facilitar a extensão futura do método para o caso de se considerar as reações de cinética química, que explicam a formação dos óxidos de nitrogênio e

outros poluentes [95]. Pelo mesmo motivo foi considerada em separado a presença do argônio no ar, que tradicionalmente é incluído no nitrogênio por ser inerte.

Os gases acima são considerados em equilíbrio químico e tratados como gases ideais. Embora nos motores se atinjam pressões bastante elevadas, a hipótese de gas ideal é bastante razoável. Zacharias [96] aplicou a equação de estado de Beattie-Bridgeman com a expansão virial até quarta ordem para a mistura de gases que resulta da combustão. Os resultados por ele obtidos mostram que, para pressões de até 100 atm e temperaturas de até 2500 K o fator de compressibilidade Z é igual a um, o que significa que nessa faixa a hipótese de gas ideal é válida. Mesmo acima desses valores de pressão e temperatura, os erros máximos cometidos estão em uma faixa de $\pm 2\%$ para a entropia e de $\pm 4\%$ para a entalpia.

3.2 - CALCULOS PRELIMINARES DE PROPRIEDADES

O estado psicrométrico do ar ambiente é definido pelos dados de entrada: temperatura ambiente, pressão barométrica e umidade relativa do ar. Para se obter a pressão de saturação do vapor de água presente no ar, emprega-se a equação de Antoine [97]:

$$P_{sat} = 133,322 \exp \left[\frac{Ca - Cb}{T_{amb} + Cc} \right] + 25 \quad (3.1)$$

em $[N/m^2]$, onde Ca, Cb e Cc são constantes para uma dada substância. Esta correlação fornece excelentes resultados na faixa de interesse, com erro máximo de 0,56% entre 5 e 40°C e erros usuais menores do que 0,1%, como pode ser visto na tabela 3.1.

Uma vez determinada a pressão de saturação do vapor, a pressão de vapor, as frações molares de ar seco e de vapor e a umidade absoluta do ar podem ser determinadas por:

$$P_v = \phi P_{sat} \quad (3.2)$$

$$y_a = (P_{amb} - P_v) / P_{amb} \quad (3.3)$$

$$y_v = 1 - y_a \quad (3.4)$$

$$UA = y_v / y_a \quad (3.5)$$

Tabela 3.1 - Avaliação da equação de Antoine
(pressões em N/m^2)

T °C	P _{sat} tab.	P _{sat} cal.	Erro %
5,0	872,1	877,0	0,56
10,0	1227,6	1230,4	0,23
15,0	1705,1	1706,2	0,064
20,0	2339,0	2338,3	-0,028
25,0	3169,0	3168,1	-0,028
30,0	4246,0	4244,9	-0,026
35,0	5628,0	5627,2	-0,014
40,0	7384,0	7383,8	-0,002

$$\omega = 0,62197 P_v / (P_{amb} - P_v) \quad (3.6)$$

O ar seco possui a seguinte composição [98]: 0,20946 O₂, 0,78084 N₂, 0,00033 CO₂ e 0,00937 Ar. Correspondente a essa composição, o mol aparente do ar (Mar) resulta em:

$$\begin{aligned} Mar &= 0,78084 M_{N_2} + 0,20946 M_{O_2} + 0,00033 M_{CO_2} + 0,00937 M_{Ar} \\ &= 28,9652 \end{aligned} \quad (3.7)$$

Para o ar úmido, o mol aparente pode ser obtido por:

$$Maru = \frac{m_{ar} + m_v}{n_{ar} + n_v} = (28,9652 + u_a 18,0154) / (1 + u_a) \quad (3.8)$$

onde u_a é o número de moles de água presente no ar, por mol de ar seco.

O combustível é considerado como uma mistura do combustível puro com água. O mol do combustível puro ($C_nH_mO_f$) é dado por:

$$Rmolc = 12,01115 n + 1,008 m + 15,9994 f \quad (3.9)$$

e o mol aparente do combustível úmido por:

$$M_{com} = \frac{m_{com} + m_{H_2O}}{n_{com} + n_{H_2O}} = \frac{\left[\frac{P_c}{(1-P_c)} + 1 \right] R_{molc}}{\left[\frac{P_c}{(1-P_c)} + \frac{R_{molc}}{18,0154} \right]} \quad (3.10)$$

onde $(1-P_c)$ é a fração em massa de água presente no combustível.

A mistura ar-combustível resultante possui um mol aparente dado por:

$$M_{ac} = \frac{m_{aru} + m_{com}}{n_{aru} + n_{com}} = \frac{(ACRU + 1) M_{aru}}{ACRU + \frac{M_{aru}}{M_{com}}} \quad (3.11)$$

onde ACRU é a relação ar-combustível em massa, em base úmida.

Uma vez conhecido o fluxo de massa de combustível (DC) e a relação ar-combustível em base úmida, pode-se determinar as massas de combustível (CM) e de ar (AM) por ciclo:

$$CM = 120 \text{ DC} / \text{RPM} \quad (3.12)$$

$$AM = ACRU \text{ CM} \quad (3.13)$$

O número de moles de água no combustível, o número de moles de combustível puro e a relação entre eles resulta:

$$u_c = (1-P_c) \text{ CM} / 18,0154 \quad (3.14)$$

$$x = P_c \text{ CM} / R_{molc} \quad (3.15)$$

$$UCMC = u_c / x \quad (3.16)$$

A relação ar-combustível estequiométrica em base seca (ACES) e em base úmida (ACEU) são dadas respectivamente por:

$$ACES = \left[\frac{m_{ar \text{ seco}}}{m_{comb \text{ seco}}} \right]_{est} = 138,2852 \text{ } n_{ae} / R_{molc} \quad (3.17)$$

$$ACEU = \left[\frac{m_{ar \text{ umido}}}{m_{comb \text{ umido}}} \right]_{est} = \frac{(138,2852 + 88,0088 \text{ UA}) n_{ae}}{(R_{molc} + 18,0154 \text{ UCMC})} \quad (3.18)$$

onde n_{ae} é o número de moles de oxigênio para a combustão completa.

A relação ar-combustível real em base seca é:

$$ACRS = \frac{m_{\text{ar seco}}}{m_{\text{comb seco}}} = \frac{AM}{(1 + \omega) P_c CM} \quad (3.19)$$

Finalmente, o coeficiente de ar teórico (α) é definido por

$$\alpha = ACRU / ACEU = ACRS / ACES \quad (3.20)$$

3.3 - AS PROPRIEDADES DE CADA SUBSTANCIA

Para cada substância considerada devem ser conhecidas algumas propriedades primitivas, como o calor específico a pressão constante, a entalpia de formação e a entropia absoluta a 25°C e uma atmosfera. A partir de valores tabelados do calor específico a pressão constante em função da temperatura [99], foram obtidas regressões polinomiais de grau cinco, para cada substância (i), nas faixas de temperatura de 200 a 1500 K e de 1500 a 6000 K. No caso do argônio, o calor específico foi obtido da referência [100] e para os diversos combustíveis (gasolina, etanol, metanol, metano, óleo diesel) das referências [101-104]. O erro máximo assim obtido foi de 0,6%, com erros usuais menores do que 0,1% em relação aos valores tabelados. A tabela 3.2 indica os coeficientes obtidos para cada substância em cada faixa, bem como os erros máximos encontrados, para os gases de combustão. O mesmo é mostrado na tabela 3.3 para os combustíveis.

Os valores de entalpia de formação, entropia a 25°C e uma atmosfera (apresentados na tabela 3.4) das substâncias puras foram obtidos das fontes já citadas. Para a gasolina e o óleo diesel, foram empregados os valores indicados em [105]. A energia livre de Gibbs de formação para cada substância foi calculada a partir da reação de formação dessa substância, por método recorrential, a partir da definição de energia livre de Gibbs e do valor nulo desta para as substâncias compostas por um único tipo de átomo. A tabela 3.4 mostra também a energia livre de Gibbs de formação. Para exemplificar o método de cálculo, seja a reação de formação do vapor d'água:

TABELA 3.2 - Coeficientes para o calor específico a pressão constante - base molar
 Fonte de dados: (i) - [99]; (ii) - [100]
 (1) - de 200 a 1500 K ; (2) - de 1500 a 6000 K

Subst.	Faixa	Erro máx.	A0	A1	A2	A3	A4	A5
N ₂	(1)	0.14 %	7.12763	-0.123389	.162966E-01	.279778E-02	-.354210E-03	.103763E-04
	(2)	0.12 %	6.55510	0.192874	-.625377E-02	.982341E-04	-.657299E-06	.108651E-08
O ₂	(1)	0.06 %	7.56205	-0.666191	.231369	-.270809E-01	.141882E-02	-.280768E-04
	(2)	0.06 %	8.01136	.305953E-01	.188509E-02	-.515413E-04	.411064E-06	-.712815E-09
CO ₂	(1)	0.10 %	4.58457	1.88775	-.175657	.953387E-02	-.277251E-03	.320362E-05
	(2)	0.15 %	10.9586	0.323944	-.103938E-01	.162324E-03	-.107195E-05	.176227E-08
H ₂ O	(1)	0.06 %	8.30929	-0.384317	.128655	-.122158E-01	.592055E-03	-.118590E-04
	(2)	0.11 %	5.31521	0.608009	-.178480E-01	.255005E-03	-.161848E-05	.262723E-08
CO	(1)	0.13 %	7.25186	-0.252580	.595721E-01	-.257497E-02	-.622332E-04	.447012E-05
	(2)	0.12 %	6.79561	0.177182	-.581548E-02	.929483E-04	-.634231E-06	.105613E-08
H ₂	(1)	0.38 %	4.55986	1.64506	-.417652	.497455E-01	-.276015E-02	.583474E-04
	(2)	0.08 %	5.07614	0.261845	-.725293E-02	.113203E-03	-.774592E-06	.129234E-08
NO	(1)	0.04 %	8.46184	-1.02193	.261789	-.265983E-01	.126180E-02	-.231686E-04
	(2)	0.10 %	7.19977	0.147681	-.484560E-02	.777611E-04	-.533650E-06	.890572E-09
OH	(1)	0.13 %	8.08307	-0.535024	.100411	-.897918E-02	.447289E-03	-.938293E-05
	(2)	0.04 %	5.38643	0.252548	-.733460E-02	.105691E-03	-.679287E-06	.110801E-08
N	(1)	0.00 %	4.96800	0.0	.0	.0	.0	.0
	(2)	0.05 %	4.57042	.663853E-01	-.393282E-02	.954828E-04	-.768754E-06	.134008E-08
H	(1)	0.00 %	4.96800	0.0	.0	.0	.0	.0
	(2)	0.00 %	4.96800	0.0	.0	.0	.0	.0
O	(1)	0.10 %	6.25960	-0.625628	.130043	-.136016E-01	.699867E-03	-.140644E-04
	(2)	0.04 %	5.05262	-.448774E-02	-.167901E-03	.128618E-04	-.142341E-06	.268410E-09
Ar	(1)	0.00 %	4.96460	0.0	.0	.0	.0	.0
	(2)	0.00 %	4.96460	0.0	.0	.0	.0	.0

TABELA 3.3 - Coeficientes para o calor específico a pressão constante - base molar
 Fonte de dados: (i) - [1031]; (ii) - [102]; (iii) - [104]; (iv) - [105]; (v) - [101]
 Faixa: (i) - de 273.15 a 1473.15 K; (2) - de 200 a 1000 K

Subst.	Erro máx.	A0	A1	A2	A3	A4	A5
C ₂ H ₅ OH (i) (1)	0,18 %	6,72372	3,582737	0,121300E-02	-0,408992E-03	0,268607E-04	-0,601989E-06
CH ₃ OH (ii) (2)	0,12 %	7,12416	0,20664E-02	0,653365E-02	-0,923063E-03	0,535943E-04	-0,116203E-05
CH ₄ (iii) (2)	0,21 %	9,87300	-1,842448	0,817458E-02	-0,945103E-03	0,495197E-04	-0,100508E-05
C ₇ H ₁₇ (iv) (2)	0,00 %	8,07757	12,116116	-0,373570E-02	-0,994028E-08	0,856187E-09	-0,282496E-10
C ₁₄ H ₂₄ , 9 (iv) (2)	0,00 %	15,83838	23,752599	-0,732370E-02	0,558178E-08	-0,791050E-09	0,361043E-10
i-C ₈ H ₁₈ (v) (2)	0,05 %	-2,27100	18,802052	-0,104502E-01	0,197567E-03	0,387519E-05	-0,128205E-06

Tabela 3.4 - Entalpias de formação [kcal/kg], entropias a 25°C e uma atmosfera e energia livre de Gibbs de formação [kcal/kgmol.K]

Subst.	Fonte	$(\bar{h}_f^\circ)$	$(\bar{s}^\circ)_{25^\circ\text{C}}$	$(\bar{g}_f^\circ)$
N ₂	[99]	0,0	45,770	0,0
O ₂	[99]	0,0	49,004	0,0
CO ₂	[99]	-94054,0	51,072	-94265,0
H ₂ O	[99]	-57797,9	45,106	-54636,0
CO	[99]	-26420,0	47,214	-32786,0
H ₂	[99]	0,0	31,208	0,0
NO	[99]	21580,0	50,347	20967,0
OH	[99]	9432,0	43,880	8306,9
N	[99]	112965,0	36,614	108872,0
H	[99]	52100,0	27,392	48585,4
O	[99]	59559,0	38,468	55395,0
Ar	[100]	0,0	36,983	0,0
C ₂ H ₅ OH	[101]	-56286,0	67,515	-40366,0
C ₇ H ₁₇	[105]	-68830,0	111,186	-15054,0
CH ₄	[101]	-17897,0	44,520	-12146,0
CH ₃ OH	[101]	-48074,0	57,289	-38835,0
Diesel	[105]	-23886,0	154,251	51802,0
i-C ₈ H ₁₈	[101]	-53570,0	101,102	3270,0



A variação da energia livre de Gibbs para a reação, a 25°C e uma atmosfera é

$$G_P - G_R = (\bar{g}_f^\circ)_{\text{H}_2\text{O}} - (\bar{g}_f^\circ)_{\text{H}_2} - 0,5 (\bar{g}_f^\circ)_{\text{O}_2} \quad (3.22)$$

Pela definição de energia livre de Gibbs:

$$\begin{aligned} (\bar{g}_f^0)_{\text{H}_2\text{O}} - (\bar{g}_f^0)_{\text{H}_2} - 0,5 (\bar{g}_f^0)_{\text{O}_2} &= (\bar{h}_f^0)_{\text{H}_2\text{O}} - (\bar{h}_f^0)_{\text{H}_2} - 0,5 (\bar{h}_f^0)_{\text{O}_2} \\ &- T_0 [(\bar{s}^0)_{\text{H}_2\text{O}} - (\bar{s}^0)_{\text{H}_2} - 0,5 (\bar{s}^0)_{\text{O}_2}] \end{aligned} \quad (3.23)$$

como $(\bar{g}_f^0)_{\text{H}_2}$, $(\bar{g}_f^0)_{\text{O}_2}$, $(\bar{h}_f^0)_{\text{H}_2}$ e $(\bar{h}_f^0)_{\text{O}_2}$ são nulos, substituindo os valores dos demais termos a 25°C e uma atmosfera, obtém-se:

$$(\bar{g}_f^0)_{\text{H}_2\text{O}} = -54636 \quad [\text{kCal/kg}] \quad (3.24)$$

Para se determinar o calor específico molar a pressão constante de uma dada substância (i), usa-se:

$$\bar{C}_p(i) = A_0 + A_1.T + A_2.T^2 + A_3.T^3 + A_4.T^4 + A_5.T^5 \quad (3.25)$$

As demais propriedades termodinâmicas (como o calor específico a volume constante, a entalpia, a energia interna, a entropia e a energia livre de Gibbs) foram obtidas a partir dessas correlações, dada a hipótese assumida de que todas as substâncias podem ser tratadas como gases ideais:

$$\bar{C}_v(i) = \bar{C}_p(i) - \bar{R} \quad (3.26)$$

$$\bar{h}(i) = \bar{h}_f^0(i) + \int_{T_0}^T \bar{C}_p(i) dT \quad (3.27)$$

$$\bar{u}(i) = \bar{h}(i) - \bar{R} T \quad (3.28)$$

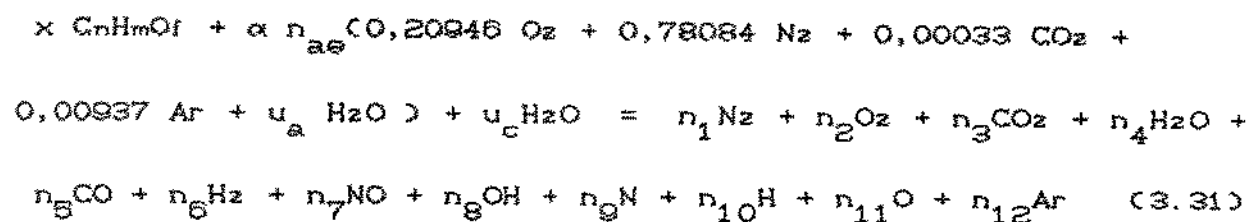
$$\bar{s}(i) = \bar{s}^0(i) + \int_{T_0}^T \left[\bar{C}_p(i) / T \right] dT \quad (3.29)$$

$$\bar{g}(i) = \bar{g}_f(i) + \bar{h}(i) - \bar{h}_f^0(i) - T.\bar{s}(i) + T_0.\bar{s}^0(i) \quad (3.30)$$

onde $\bar{h}_f^0(i)$, $\bar{s}^0(i)$ e $\bar{g}_f(i)$ são, respectivamente, a entalpia de formação, a entropia molar absoluta e a energia livre de Gibbs de formação, todos a 25°C e uma atmosfera. Uma vez que a entalpia e a entropia de cada substância provém do cálculo de uma integral, os erros associados ao calor específico são suavizados e então os valores de entalpia e entropia apresentam erros ainda menores do que os já reportados para o calor específico.

3.4 - A COMPOSIÇÃO DE EQUILÍBRIO QUÍMICO

A reação de combustão genérica, com o coeficiente de ar teórico α , composição do ar úmido, combustível com unidade e todos os produtos de combustão assumidos em equilíbrio químico é dada por:



onde o termo entre parêntesis representa a composição do ar úmido, u_c é o número de moles de água presente no combustível e n_{ae} é o número de átomos de oxigênio para a queima estequiométrica:

$$n_{ae} = x (2, n + m/2 - f) / 0,41892 \quad (3.32)$$

As equações de balanço de átomos de carbono, hidrogênio, oxigênio e nitrogênio fornecem quatro equações independentes. O balanço de argônio permite a determinação imediata de n_{12} :

$$n_{12} = \alpha n_{ae} 0,00937 \quad (3.33)$$

O balanço de nitrogênio é dado por:

$$2 n_1 + n_7 + n_9 = \alpha n_{ae} 1,56168 \quad (3.34)$$

Analogamente, para o balanço de carbono:

$$n_3 + n_5 = x n + \alpha n_{ae} 0,00033 \quad (3.35)$$

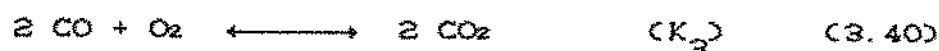
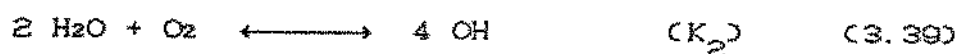
para o balanço de hidrogênio:

$$2n_4 + 2n_6 + n_8 + n_{10} = x m + 2 \alpha n_{ae} u_a + 2u_c \quad (3.36)$$

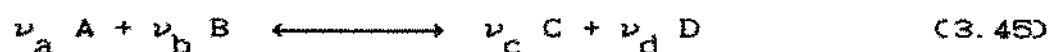
e para o oxigênio:

$$2n_2 + 2n_3 + n_4 + n_5 + n_7 + n_8 + n_{11} = x f + \alpha n_{ae} (0.41258 + u_a) + u_c \quad (3.37)$$

As equações acima constituem um sistema de quatro equações e onze incógnitas (n_1 a n_{11}). São necessárias então sete equações de equilíbrio químico, correspondentes às reações:



Seja a reação química hipotética abaixo, com coeficientes estequiométricos ν_i e onde as quatro substâncias estão na fase gasosa:



Pode-se então provar [75] que a constante de equilíbrio químico K_T para essa reação (caso A,B,C,D possam ser tratados como gases ideais) é dada por:

$$K_T = \frac{y_C^{\nu_c} y_D^{\nu_d}}{y_A^{\nu_a} y_B^{\nu_b}} \left(\frac{P}{P_o} \right)^b \quad (3.46)$$

com

$$b = \nu_c + \nu_d - \nu_a - \nu_b$$

onde y_i é a fração molar do componente i, b é a variação do número de moles durante a reação, P_o é uma pressão de referência (normalmente uma atm.) e P é a pressão em que ocorre a reação.

Por outro lado, K_T pode ser obtida de

$$\ln(K_T) = - \frac{\Delta G_o}{\bar{R} T} \quad (3.47)$$

onde ΔG_o é a variação da energia Livre de Gibbs na reação, na temperatura T e uma atm. - ou seja, K_T é apenas função da temperatura. A tabela 3.5 mostra os erros obtidos em K_T para as reações indicadas nas equações (3.38) a (3.44), em relação aos valores da referência [99].

Uma vez que as constantes de equilíbrio químico foram calculadas a partir da equação (3.47), que envolve uma exponencial, os erros indicados na tabela 3.5 podem ser considerados bastante baixos. A reação que apresenta consistentemente os maiores erros (3.42) corresponde à reação de menor importância, como será mostrado adiante.

Os métodos usuais de solução do sistema de equações não lineares resultante envolvem a convergência simultânea de quatro variáveis. Way [106] utiliza a densidade e a temperatura como parâmetros conhecidos ao invés da pressão e da temperatura e mostra que é possível trabalhar com a convergência de uma única

Tabela 3.5 - Erros relativos percentuais entre os valores calculados e tabelados da constante de equilíbrio químico K_T . Referência [99].

Reação	Temperatura K					
	1500	2000	2500	3000	3500	4000
(3.38)	0,04 %	0,03 %	0,07 %	0,06 %	0,14 %	0,22 %
(3.39)	0,37 %	0,44 %	0,52 %	0,08 %	0,61 %	0,28 %
(3.40)	0,04 %	0,24 %	0,37 %	0,12 %	0,33 %	0,34 %
(3.41)	0,42 %	0,35 %	0,01 %	0,05 %	0,14 %	0,13 %
(3.42)	1,12 %	0,85 %	1,11 %	0,57 %	0,71 %	0,83 %
(3.43)	0,38 %	0,39 %	0,22 %	0,23 %	0,14 %	0,21 %
(3.44)	0,34 %	0,06 %	0,14 %	0,13 %	0,08 %	0,08 %

variável, o que facilita o método numérico de solução do sistema de equações. Através da equação de estado pode-se mudar as constantes de equilíbrio químico, eliminando a pressão e as frações molares:

$$K_T = \frac{n_C^{\nu_c} n_D^{\nu_d}}{n_A^{\nu_a} n_B^{\nu_b}} \left(\frac{P}{n_T P_0} \right)^b \quad (3.48)$$

como

$$P / n_T = \bar{R} T / V \quad (3.49)$$

então

$$K_T = \frac{n_C^{\nu_c} n_D^{\nu_d}}{n_A^{\nu_a} n_B^{\nu_b}} \left(\frac{\bar{R} T}{V P_0} \right)^b \quad (3.50)$$

Define-se então uma nova constante de equilíbrio químico (K') tal que:

$$K'_1 = \left[K_T \left(\frac{V P_0}{\bar{R} T} \right)^b \right]_1 = \frac{n_C^{\nu_c} n_D^{\nu_d}}{n_A^{\nu_a} n_B^{\nu_b}} \quad (3.51)$$

e dessa forma a nova constante de equilíbrio depende do número de moles dos reagentes e produtos e não mais da pressão e das frações molares.

Para as reações relevantes a este problema, as constantes de equilíbrio químico K' serão:

$$K'_1 = \frac{(n_7)^2}{n_1 \cdot n_2} \quad (3.52)$$

$$K'_2 = \frac{(n_8)^4}{(n_4)^2 \cdot n_2} \quad (3.53)$$

$$K'_3 = \frac{(n_3)^2}{(n_5)^2 \cdot n_2} \quad (3.54)$$

$$K'_4 = \frac{(n_4)^2}{(n_8)^2 \cdot n_2} \quad (3.55)$$

$$K'_5 = \frac{(n_9)^2}{n_1} \quad (3.56)$$

$$K'_6 = \frac{(n_{10})^2}{n_8} \quad (3.57)$$

$$K'_7 = \frac{(n_{11})^2}{n_2} \quad (3.58)$$

Pode-se então mostrar que a única variável que precisa ser arbitrada é n_2 - ou seja, o número de moles de oxigênio. As equações para cada componente da mistura serão:

$$n_{11} = \sqrt{K'_7 n_2} \quad (3.59)$$

$$n_1 = \left\{ \left[0,78084 \alpha n_{ae} + 0,0625 \left(\sqrt{K'_1 n_2} + \sqrt{K'_5} \right)^2 \right]^{0,5} - 0,25 \left[\sqrt{K'_1 n_2} + \sqrt{K'_5} \right] \right\}^2 \quad (3.60)$$

$$n_7 = \sqrt{K'_1 n_1 n_2} \quad (3.61)$$

$$n_9 = \sqrt{K'_5 n_1} \quad (3.62)$$

$$n_5 = (\alpha n + \alpha n_{ae} 0,00033) / [1 + (K'_3 n_2)^{0,5}] \quad (3.63)$$

$$n_3 = \alpha n + \alpha n_{ae} 0,00033 - n_5 \quad (3.64)$$

$$n_4 = \left\{ \left[\sqrt{bb^2 + 4 aa cc} - bb \right] / (2 aa) \right\}^2 \quad (3.65)$$

onde

$$aa = 2 + 2 / \sqrt{K'_4 n_2}$$

$$bb = \sqrt[4]{n_2 K'_2} + \left[K'_6 / (K'_4 n_2)^{0.5} \right]^{0.5}$$

$$cc = x m + 2 \alpha n_{ae} u_a + 2 u_c$$

$$n_8 = \sqrt{n_4} \cdot \sqrt[4]{n_2 K'_2} \quad (3.66)$$

$$n_6 = n_4 / (K'_4 n_2)^{0.5} \quad (3.67)$$

$$n_{10} = \sqrt{K'_6 n_6} \quad (3.68)$$

Com o valor inicial de n_2 , calcula-se os demais números de moles pelas equações (3.59) a (3.68). A verificação do valor inicial de n_2 é feita a partir do balanço átomos de oxigênio, equação (3.37), reescrita como:

$$\begin{aligned} \Delta = & x f + \alpha n_{ae} (0,41958 + u_a) + u_c - 2 n_2 - 2 n_3 - n_4 \\ & - n_5 - n_7 - n_8 - n_{11} \end{aligned} \quad (3.69)$$

Na solução exata Δ deverá ser zero. A convergência para o valor adequado é obtida por um procedimento numérico de atualização do valor de n_2 . Embora vários métodos numéricos clássicos pudessem ser testados, optou-se por um procedimento de convergência em duas etapas, para garantir a convergência em qualquer caso. Na primeira etapa, dependendo do sinal de Δ , o valor de n_2 é dobrado ou dividido por dois. Na segunda etapa, que inicia quando ocorre a primeira mudança de sinal em Δ , o valor de n_2 é atualizado por uma média inversamente ponderada dos dois valores anteriores com seus erros respectivos como pesos:

$$\left(n_2 \right)_{i+1} = \frac{(n_2)_{i-1} | \Delta |_i + (n_2)_i | \Delta |_{i-1}}{| \Delta |_{i-1} + | \Delta |_i} \quad (3.70)$$

Para inicializar o procedimento de convergência, um valor

estimado de n_2 é necessário. Pode-se mostrar que [106]

$$(n_2)_0 = A + \frac{B}{\sqrt{A}} \quad \text{se} \quad \frac{A}{B^{2/3}} > 1 \quad (3.71)$$

$$(n_2)_0 = A + B^{2/3} \quad \text{se} \quad 0 \leq \frac{A}{B^{2/3}} \leq 1 \quad (3.72)$$

$$(n_2)_0 = B^{2/3} \quad \text{se} \quad -1 \leq \frac{A}{B^{2/3}} \leq 0 \quad (3.73)$$

$$(n_2)_0 = (B/A)^2 \quad \text{se} \quad \frac{A}{B^{2/3}} < -1 \quad (3.74)$$

onde

$$A = \frac{x_f}{2} + \alpha n_{ao} 0,20946 - x.n - \frac{x.m}{4}$$

$$B = \left[\frac{x.n}{\sqrt{K'_3}} + \frac{x.m}{2\sqrt{K'_4}} \right]$$

representa um valor inicial adequado para garantir que o processo obtenha a convergência com um número de iterações razoável. O processo é concluído quando Δ se torna menor que um valor previamente estipulado.

Foram criadas duas sub-rotinas que determinam a composição da mistura - chamadas COMTV e COMTP. A primeira, considerando como variáveis conhecidas a temperatura, o volume e as massas e a segunda, a temperatura e a pressão. Isto permite que se obtenham as vantagens do método de Way para a maioria das situações mas preserva a possibilidade de se trabalhar com P e T como variáveis conhecidas quando necessário. A sub-rotina COMTP é uma alteração da COMTV; após ser resolvido o algoritmo desta última, a pressão é calculada pela equação de gas perfeito e comparada com o valor requerido. O método de Newton-Raphson é empregado para atualizar o valor do volume e se repete o procedimento até que a pressão concorde com o valor estipulado dentro de um erro pré-estabelecido. Evidentemente, o tempo de execução da sub-rotina COMTV é menor.

Como exemplos dos resultados que podem ser obtidos, a tabela

3.6 mostra os efeitos da umidade relativa do ar , para uma relação ar-combustível estequiométrica, com o octano como combustível e a tabela 3.7 os efeitos da umidade presente no álcool combustível, para as substâncias que mais são afetadas em suas frações molares.

Tabela 3.6 - Efeito da umidade relativa do ar sobre as frações molares de H_2O e H_2 . Octano, α : 1,0 pressão: 10 atm.

Temp. [K]	H_2O		H_2	
	UR = 100%	UR = 0 %	UR = 100%	UR = 0 %
1500	0,1653	0,1402	0,0000	0,0000
2000	0,1644	0,1394	0,0005	0,0004
2500	0,1574	0,1334	0,0037	0,0032
3000	0,1321	0,1114	0,0137	0,0116
3500	0,0815	0,0677	0,0302	0,0253
4000	0,0293	0,0235	0,0355	0,0292

Tabela 3.7 - Efeito da umidade presente no combustível sobre as frações molares de H_2O e H_2 . α : 1,0. pressão 10 atm.

Temp. [K]	H_2O		H_2	
	AEHC	Anidro	AEHC	Anidro
1500	0,1920	0,1837	0,0000	0,0000
2000	0,1910	0,1828	0,0006	0,0006
2500	0,1830	0,1751	0,0043	0,0041
3000	0,1543	0,1474	0,0159	0,0151
3500	0,0965	0,0912	0,0349	0,0333
4000	0,0357	0,0337	0,0416	0,0398

Deve ser observado que os resultados apresentados para o álcool etílico hidratado carburante (AEHC) referem-se a uma gradação alcoólica de 93,9 INPM, que significa 93,9 % de etanol em massa. A Norma do Conselho Nacional de Petróleo estabelece para o AEHC uma gradação alcoólica de 91,1 a 93,9 INPM; assim, se a gradação for menor, as diferenças entre o álcool anidro e o AEHC serão ainda maiores. Uma análise cruzada das tabelas 3.6 e 3.7 também permite avaliar, para mesma temperatura, mesma pressão e na relação ar-combustível estequiométrica, os teores de água para o octano e o AEHC em ar seco. Outros resultados do uso das sub-rotinas de cálculo da composição química, incluindo comparações com resultados de outros autores, podem ser encontrados no Apêndice 1.

3.5 - AS PROPRIEDADES DA MISTURA DE GASES

A sub-rotina de cálculo de propriedades (PROP), que gerencia o cálculo de propriedades termodinâmicas de misturas de gases perfeitos, pode fornecer os valores de energia interna, entalpia, entropia, etc para cada caso relevante: apenas ar úmido, mistura ar-combustível, mistura ar-combustível e resíduos de combustão, ou produtos de combustão. Para qualquer mistura, as propriedades podem ser obtidas pelas equações seguintes, válidas para misturas de gases ideais:

$$H_{\text{mis}} = \sum_{i=1}^{13} \bar{h}(i) n_i \quad (3.75)$$

$$U_{\text{mis}} = H_{\text{mis}} - n_T \bar{R} T \quad (3.76)$$

$$(\bar{C}_p)_{\text{mis}} = \sum_{i=1}^{13} \bar{C}_p(i) n_i / n_T \quad (3.77)$$

$$(\bar{C}_v)_{\text{mis}} = (\bar{C}_p)_{\text{mis}} - \bar{R} \quad (3.78)$$

$$\left(\text{Mol} \right)_{\text{mis}} = \sum_1^{13} \text{Mol}_i \cdot n_i / n_T \quad (3.79)$$

$$S_{\text{mis}} = \sum_1^{13} n_i \left[\bar{S}_o(i) - \bar{R} \ln \left(\frac{n_i P}{n_T P_o} \right) \right] \quad (3.80)$$

onde n_T é o número total de moles da mistura, n_{13} é o número de moles de combustível e a somatória refere-se às substâncias efetivamente presentes na mistura que está sendo considerada.

No caso dos resíduos e dos produtos de combustão, considera-se uma composição química "congelada" a 700 K para todas as temperaturas abaixo deste valor. Com este procedimento, evita-se o surgimento de valores de constantes de equilíbrio químico K_T extremamente altos ou baixos, que podem causar "overflow" ou "underflow" em alguns tipos de computadores. No apêndice 1 é mostrado que as concentrações de cada substância relevante não são afetadas por este procedimento; uma vantagem adicional consiste na redução do tempo de computação.

3.6 - A EXERGIA TOTAL DA MISTURA DE GASES

Para se obter a exergia total da mistura de gases, é preciso conhecer a exergia química de cada substância que compõe a mistura. Neste trabalho foi adotada a metodologia de Szargut e colaboradores [71, 83, 84], já discutida no Capítulo 2:

$$\overline{\text{ex}}^q(i) = (\bar{g}_f^o)_i + \sum \nu_{e,i} \overline{\text{ex}}_{e,i} \quad (3.81)$$

onde $\overline{\text{ex}}_{e,i}$ é a exergia padrão de cada elemento químico que constitui a substância que está sendo tratada. A tabela 3.8 mostra os valores da exergia química dos elementos que estão sendo considerados neste trabalho. A tabela 3.9 indica os valores de exergia química obtidos para as diversas substâncias, incluído alguns combustíveis. A sub-rotina de cálculo de propriedades requer sempre os dados termodinâmicos de entalpia de formação, entropia absoluta a 25°C e uma atmosfera, mesmo para combustí-

Tabela 3.8 - Exergia química padrão molar de alguns elementos químicos, segundo [84]. [kcal/kgmol]

Elemento	N	O	C (graf)	H	Ar
Ex _{el}	86,04	474,43	98054,49	28213,43	2793,98

Tabela 3.9 - Exergia química padrão de algumas substâncias químicas [kcal/kgmol]. Erro percentual referente a [84].

Substância	$(\bar{g}_f^o)_{25^\circ\text{C}}$	Ex ^q	Erro %
N ₂	0,0	172,08	0,0000
O ₂	0,0	948,85	0,0000
CO ₂	- 94265,0	4738,35	0,2253
H ₂ O g	- 54636,0	2265,29	0,1267
CO	- 32786,0	65742,92	0,0115
H ₂	0,0	56426,86	0,0042
NO	20697,0	21257,47	0,0464
OH	8306,9	36994,76	-----
N	108872,0	108957,74	-----
H	48585,4	76798,83	0,0082
O	55395,0	55869,42	0,0247
Ar	0,0	2793,98	0,0000
C ₂ H ₅ OH	- 40366,0	325498,01	0,1478
C ₇ H ₁₆	- 15054,0	1150955,80	-----
CH ₄	- 12146,0	198762,22	0,0035
CH ₃ OH	- 38835,0	172547,65	0,0347
Diesel	51802,0	2166301,16	-----
i-C ₈ H ₁₈	- 53570,0	1238707,72	-----

veis comerciais, o que pode requerer o emprego de fórmulas químicas aproximadas e correlações empíricas ou semi-empíricas para a estimativa dos valores das propriedades desconhecidas para esses combustíveis, tais como a entalpia de formação e a entropia absoluta a 25°C e uma atmosfera.

Para uma mistura de substâncias, a exergia química pode ser obtida por

$$\overline{ex}^q(\text{mist}) = \sum_i y_i \overline{ex}_i^q + \bar{R} T_o \sum_i y_i \ln(\gamma_i y_i) \quad (3.82)$$

onde γ_i é o coeficiente de atividade química para a substância i . Esta expressão é exata para qualquer mistura de gases, líquidos ou sólidos. Para gases ideais, ou quando se assume o modelo de solução ideal, o coeficiente de atividade química é unitário e a equação anterior se reduz a

$$\overline{ex}^q(\text{mist}) = \sum_i y_i \overline{ex}_i^q + \bar{R} T_o \sum_i y_i \ln(y_i) \quad (3.83)$$

A exergia total de escoamento de uma mistura de gases ideais em base molar pode então ser escrita como:

$$\begin{aligned} \overline{ex}_f(\text{mis}) = & \sum_i y_i \overline{ex}_i^q + \bar{R} T_o \sum_i y_i \ln(y_i) + \sum_i y_i \int_{T_o}^T \bar{C}_{p_i} dT \\ & - T_o \sum_i y_i \left[\int_{T_o}^T \bar{C}_{p_i} \frac{dT}{T} - \bar{R} \ln(P/P_o) \right] \end{aligned} \quad (3.84)$$

onde os dois primeiros termos representam a exergia química da mistura e os terceiro e quarto termos representam a exergia termo-mecânica.

A exergia total da mistura em base molar pode ser obtida a partir das definições de exergia total e exergia total de escoamento:

$$\overline{ex}_{\text{mis}} = \overline{ex}_{\text{mis}}^q + \overline{ex}_{\text{mis}}^{\text{tm}} \quad (3.85)$$

$$\overline{ex}_{mis}^f = \overline{ex}_{mis}^q + \overline{ex}_{mis}^{tm} \quad (3.86)$$

subtraindo membro a membro as equações (3.85) e (3.86)

$$\overline{ex}_{mis} = \overline{ex}_{mis}^f + \overline{ex}_{mis}^{tm} + \overline{ex}_{mis}^{tm} \quad (3.87)$$

substituindo os valores de $\overline{ex}_{mis}^{tm}$ e $\overline{ex}_{mis}^{tm}$:

$$\begin{aligned} \overline{ex}_{mis} = \overline{ex}_{mis}^f + (\bar{u} - \bar{u}_o)_{mis} + P_o (\bar{v} - \bar{v}_o)_{mis} \\ - T_o (\bar{s} - \bar{s}_o)_{mis} - (\bar{h} - \bar{h}_o)_{mis} + T_o (\bar{s} - \bar{s}_o)_{mis} \end{aligned} \quad (3.88)$$

considerando a relação entre a energia interna e a entalpia:

$$\begin{aligned} \overline{ex}_{mis} = \overline{ex}_{mis}^f + (\bar{h} - P\bar{v} - \bar{h}_o + P_o\bar{v}_o)_{mis} + P_o (\bar{v} - \bar{v}_o)_{mis} \\ - (\bar{h} - \bar{h}_o)_{mis} \end{aligned} \quad (3.89)$$

ou seja,

$$\overline{ex}_{mis} = \overline{ex}_{mis}^f + \bar{v} (P_o - P)_{mis} \quad (3.90)$$

expressão que pode ser reduzida a

$$\overline{ex}_{mis} = \overline{ex}_{mis}^f + \bar{R} T (P_o/P - 1) \quad (3.91)$$

A sub-rotina que gerencia o cálculo de propriedades (PROP) determina sempre os valores de $\overline{ex}_{mis}$ e de $\overline{ex}_{mis}^f$, independente do processo que está sendo analisado. O balanço de exergia, e os cálculos de irreversibilidades e da eficiência exergetica são apresentados nos Capítulos seguintes, associados aos processos particulares que estiverem sendo analisados.

CAPÍTULO 4

O MODELO DE SIMULAÇÃO

4.1 INTRODUÇÃO

Desde o surgimento dos motores de combustão interna há uma incessante busca de formas de modelamento para os vários e complexos fenômenos que ocorrem internamente ao motor. O primeiro modelo empregado foi o chamado ciclo Otto padrão a ar; já na década de 20 surgiram os ciclos ar-combustível que consideram os efeitos de qualidade da mistura, dissociação dos produtos de combustão e a presença de gases residuais. Por muito tempo o único método de cálculo do diagrama indicador era o chamado método das Cartas de propriedades [90,107]. Todavia, até os anos 60 os motores foram desenvolvidos e aperfeiçoados baseados apenas em conhecimento acumulado e estudos experimentais.

Com o surgimento dos computadores digitais se tornou possível tentar modelos de simulação que ultrapassavam os limites das hipóteses rígidas necessárias para os cálculos manuais. Alguns trabalhos clássicos que pela primeira vez empregaram computadores surgem em meados dos anos 60 [23,108,109]. Este fato modificou a prática corrente e hoje em dia é frequente se usar modelos de simulação para auxiliar no trabalho de desenvolvimento e aperfeiçoamento de motores [110-114].

O emprego de modelos detalhados de simulação da operação de um motor permite que se oriente o trabalho experimental de forma a minimizar esforços e recursos, bem como ganhar maior conhecimento dos fenômenos físicos e identificar de forma mais precisa os diversos processos. Isto é tanto mais necessário à

medida que se procuram desenvolver motores simultaneamente mais eficientes, com melhor desempenho e menor emissão de poluentes.

Embora o desenvolvimento de modelos de simulação requeira investimentos e tempo, os resultados podem ser utilizados para grande número de diferentes motores e o investimento é muito menor do que o empregado quando se trabalha apenas com pesquisas experimentais. Os ensaios em laboratório podem ser direcionados de forma mais racional se as variáveis mais relevantes puderem ser identificadas e se existir uma previsão (ao menos qualitativa) do comportamento do motor quando se mudam parâmetros e se buscam soluções de compromisso entre tendências contrárias.

Além de menores custos em ensaios, os modelos matemáticos possibilitam estudos de variação de parâmetros, que são extremamente úteis do ponto de vista didático. Podem também servir para indicar áreas ou processos sobre os quais se requer maior conhecimento teórico ou experimental.

Todos os modelos matemáticos sempre incorporam aproximações e restrições que limitam seu uso. Modelos mais simples trazem menos informação; por outro lado, modelos muito sofisticados apresentam maior dificuldade computacional e problemas quanto ao grande número de dados confiáveis necessários, bem como extensos e complexos ensaios experimentais para a validação do modelo. Há sempre um compromisso entre o grau desejado de informação e a complexidade do modelo a adotar.

Os modelos existentes podem ser divididos em duas grandes categorias: a) modelos termodinâmicos e b) modelos multidimensionais. Os modelos multidimensionais se propõem a resolver as equações diferenciais que representam a conservação de massa, de quantidade de movimento e de energia no tempo e no espaço. Apesar de mais atraentes por sua elegância e capacidade (teórica) de previsão de campos de velocidade, de pressões e concentrações de substâncias, os modelos multidimensionais ainda pertencem ao futuro distante [115]. Modelos uni e bidimensionais têm sido construídos [116-119], particularmente para estudar o escoamento interno durante o processo de lavagem do cilindro, mas não há ainda previsão de que modelos tridimensionais possam ser aplicados para todos os processos internos, com a geometria real do motor [120].

Os modelos termodinâmicos caracterizam-se por não considerar

as variáveis espaciais, embora utilizem valores de grandezas geométricas como dados ou parâmetros. São modelos termodinâmicos: os ciclos motores padrão a ar, os ciclos ar-combustível e os modelos em que o tempo é uma variável explícita. Neste caso, para os diversos processos são calculados os valores das propriedades termodinâmicas passo a passo e são usadas as equações de estado e de conservação de massa e energia. Em geral, são empregados sub-modelos específicos para cada processo de interesse, tais como a combustão, a transmissão de calor ou o fluxo de massa através de válvulas. A escolha dos sub-modelos a utilizar depende fortemente do tipo de problema que está sendo tratado e da profundidade de análise requerida. Como mencionado por Myers, os modelos termodinâmicos continuarão sendo usados no futuro, associados a sub-modelos específicos "com variados graus de ciência, pragmatismo e magia negra" [120].

4.2 - CARACTERÍSTICAS GEOMÉTRICAS

O modelo termodinâmico empregado neste trabalho requer o conhecimento de alguns parâmetros geométricos do motor que está sendo simulado. São eles: a taxa de compressão geométrica, o diâmetro do cilindro, o curso do pistão, o tamanho da biela. Com estes dados fundamentais é possível se determinar o volume instantâneo, a cilindrada, o volume da câmara de combustão. A geometria de um cilindro de um motor qualquer a pistão, bem como da articulação biela - manivela é mostrada na figura 4.1. A cilindrada é definida como o volume deslocado durante o curso completo do pistão:

$$V_c = V_{\max} - V_{\min} = \pi D^2 L / 4 \quad (4.1)$$

A taxa de compressão geométrica relaciona os volumes máximo e mínimo:

$$t_c = \frac{V_{\max}}{V_{\min}} = \frac{V_c + V_{\min}}{V_{\min}} \quad (4.2)$$

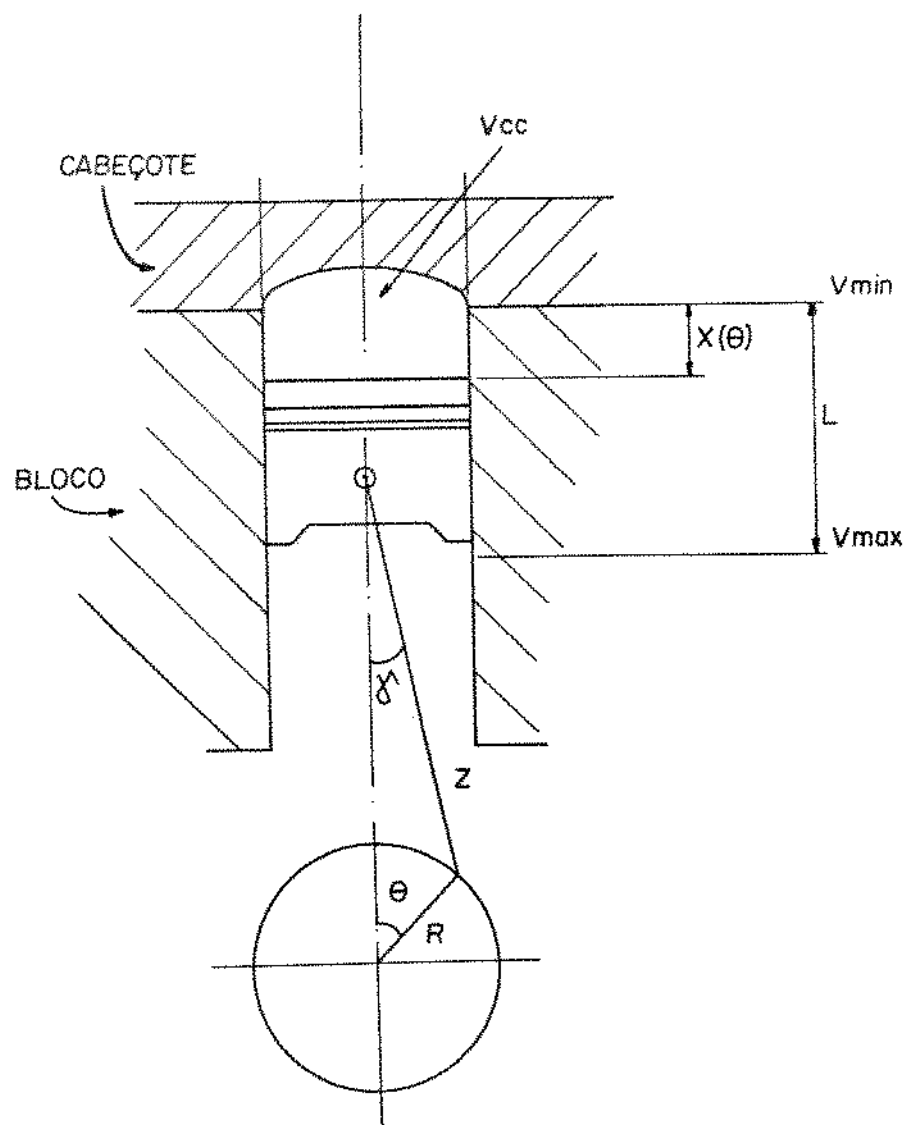


Figura 4.1 - A geometria do motor a pistão

logo, o volume da câmara de combustão V_{cc} , que é o volume mínimo, pode ser obtido:

$$V_{cc} = V_{min} = \frac{\pi D^2 L}{4 (\tau_c - 1)} \quad (4.3)$$

O volume instantâneo, expresso como função do ângulo de manivelas (θ) pode ser obtido da geometria da articulação biela - manivela. Pela figura 4.1 e ignorando as folgas dos mancais existentes entre as articulações (entre o pistão e a cabeça da biela, entre a base da biela e a árvore de manivelas):

$$V(\theta) = x(\theta) \pi D^2 / 4 + V_{cc} \quad (4.4)$$

$$L = 2 R \quad (4.5)$$

$$\gamma = \arcsen \left(\frac{L}{2Z} \sin(\theta) \right) \quad (4.6)$$

considerando ainda que

$$x(\theta) + Z \cos(\gamma) + R \cos(\theta) = Z + R \quad (4.7)$$

então

$$x(\theta) = Z + L/2 - Z \cos(\gamma) - L/2 \cos(\theta) \quad (4.8)$$

e

$$V(\theta) = \left[x(\theta) + \frac{L}{\tau_c - 1} \right] \pi D^2 / 4 \quad (4.9)$$

Para os cálculos de transmissão de calor instantânea entre os gases e as paredes do motor, são necessárias as áreas de contato: área do cabeçote, do pistão e do cilindro. Para isto, a geometria da câmara de combustão, da superfície do topo do pistão e a área instantânea das paredes laterais do cilindro que estão expostas precisam ser conhecidas. Neste trabalho, assumiu-se que a câmara de combustão é do tipo em banheira, como mostrado na fig.4.2, que é um dos tipos mais comuns para motores de ignição por centelha.

Como a câmara em banheira possui uma superfície bastante complexa, a área da superfície do cabeçote pode ser aproximada como a soma da área projetada com a área lateral de um tronco de

prisma de base elíptica. Então:

$$A_{cb} = \pi D^2/4 + \pi (a+b) K h_1 \quad (4.10)$$

onde o segundo termo é o produto do perímetro da elipse média pela altura do tronco de prisma de base elíptica h_1 . O fator K é uma função das dimensões relativas dos semi-eixos da elipse, para a determinação do perímetro [121].

A área do topo do pistão, que é plano, é dada por:

$$A_p = \pi D^2/4 \quad (4.11)$$

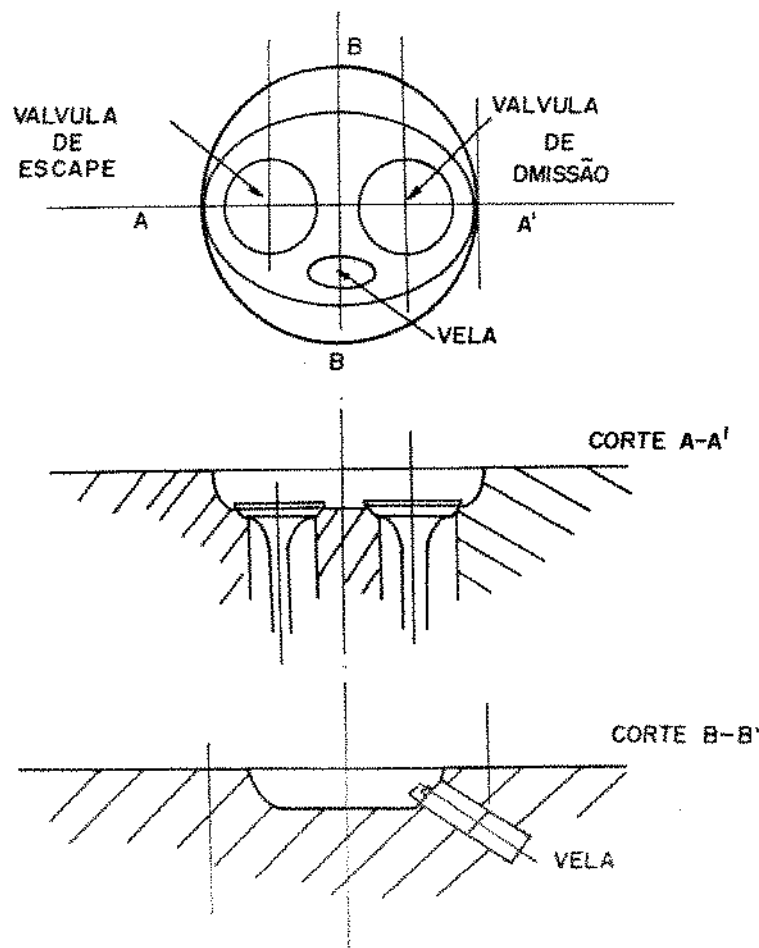


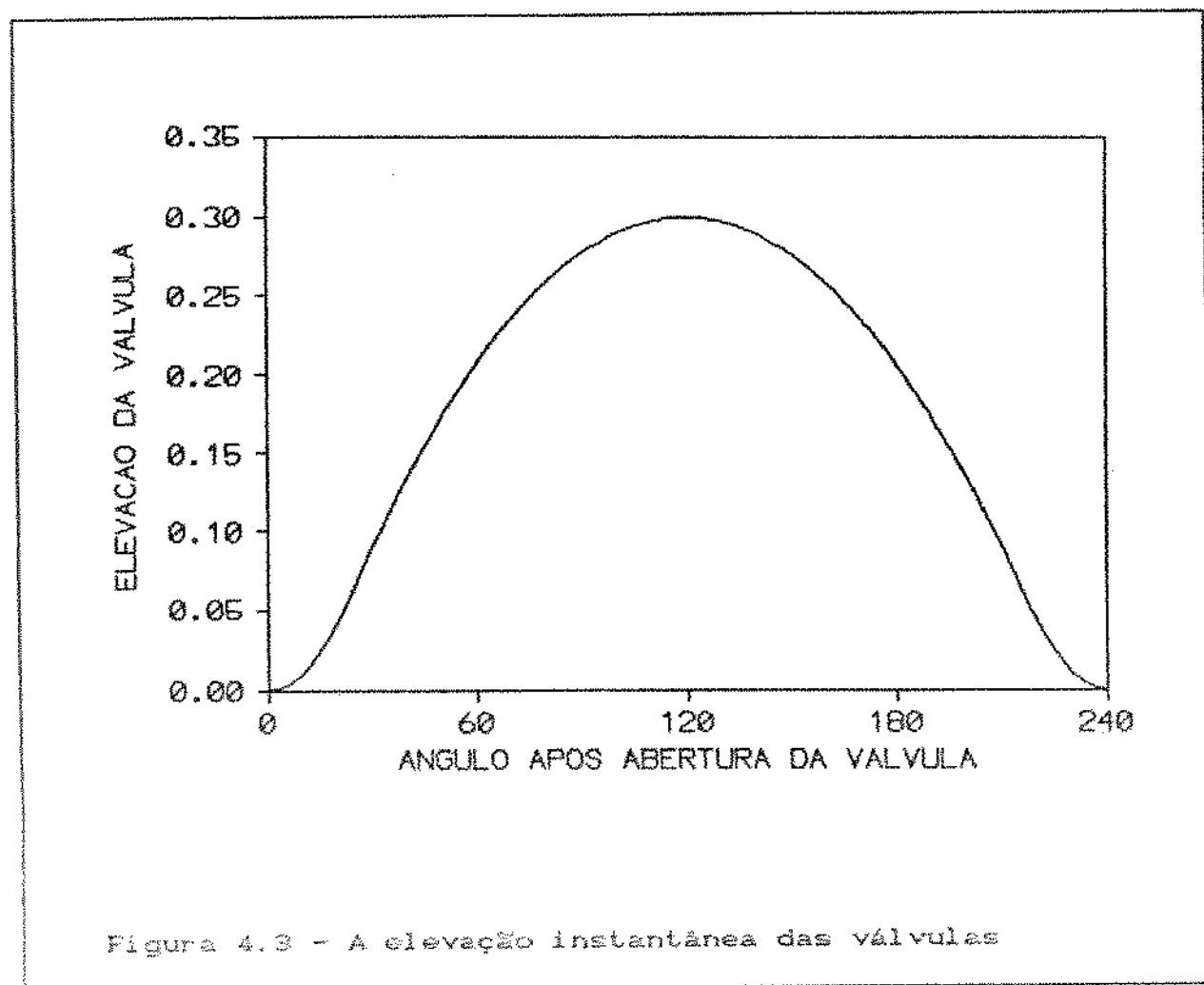
Figura 4.2 - A geometria da câmara de combustão

A área da parte do cilindro exposta aos gases possui duas componentes: uma variável no tempo, originada pelo movimento do pistão e uma fixa, que corresponde à folga entre o fim do curso do pistão e o início do cabeçote, excluindo a junta. Então:

$$A_c = \pi D [x(\theta) + x_0] \quad (4.12)$$

onde x_0 é a altura da parte do cilindro permanentemente exposta aos gases.

Há ainda parâmetros geométricos associados ao escoamento dos gases através das válvulas: o diâmetro nominal das válvulas de admissão e de escape (D_{va} e D_{ve} , respectivamente), a geometria dos cames de acionamento das válvulas - que se traduz na elevação instantânea das válvulas - e as áreas mínimas do escoamento através das válvulas.



Considerando o caráter deste trabalho, foi assumido um modelo de elevação de válvulas parabólico, tal como sugerido no trabalho de Sherman e Blumberg [122], e mostrado na figura 4.3. Admitindo uma relação de acelerações r , o valor da elevação máxima da válvula Y_{Dmax} e uma duração do evento θ_v , é possível se determinar a elevação instantânea da válvula, como mostrado em detalhes no Apêndice 2. Caso seja de interesse estudar o efeito de diferentes geometrias de cames, a elevação instantânea deve ser fornecida ao modelo de simulação.

Também no Apêndice 2 se deduzem as expressões para a área mínima do escoamento A_t , em diversos regimes de elevação da válvula, e que são apresentadas a seguir:

$$A_t = 2,221441 Y (D + Y/2) \quad \text{para } Y/D \leq 0,125 \quad (4.13)$$

$$A_t = 3,337942 D \left[Y^2 - \frac{Y D}{8} + \frac{D^2}{128} \right]^{1/2} \quad \text{para } Y/D \leq 0,274 \quad (4.14)$$

$$A_t = 0,736311 D^2 \quad \text{para } Y/D \geq 0,274 \quad (4.15)$$

onde Y é a elevação instantânea da válvula e D é o diâmetro nominal da válvula que está sendo analisada.

4.3 - A TRANSMISSÃO DE CALOR INSTANTÂNEA

A transmissão de calor dos gases para as paredes do cilindro, para o cabeçote e pistão é um fenômeno transitório, com o fluxo de calor podendo variar violentamente (de 0 até 10 MW/m²) em poucos milissegundos, com característica tridimensional, com importantes variações do fluxo de calor entre distâncias situadas a poucos centímetros uma da outra e com variações de ciclo a ciclo, dado o efeito de aleatoriedade sobre o padrão de turbulência dos gases dentro do cilindro [123].

Combinadas a essas dificuldades, as complexas geometrias das superfícies em que ocorre a transmissão de calor, tanto na câmara de combustão com fronteira móvel, quanto nos coletores de admissão e descarga, e nas passagens da água de refrigeração,

tornam impossível uma solução analítica do problema. Ainda está por ser feita uma formulação numérica tridimensional que considere todos esses efeitos, além da mudança de propriedades pelas variações dramáticas de temperatura e de composição química, bem como efeitos de radiação. Em tom de *blague*, Borman e Nishiwaki [123] caracterizam o problema da transmissão de calor como "o pesadelo dos modeladores e a agonia dos experimentalistas".

Estudos sobre a transmissão de calor global em motores de combustão interna têm sido produzidos desde há muito tempo. Como exemplo, podem ser citados o clássico trabalho de Janeway [124], hoje apenas de interesse histórico, e o trabalho analítico de Ogu_{ri} [125]. Um trabalho que merece especial atenção é o de Cole e Alkidas [126], onde são mostradas as proporções relativas das contribuições provenientes dos gases, do atrito, dos coletores e das válvulas para a carga térmica global do sistema de arrefecimento. Estes autores apresentam ainda um método para quantificar a convecção natural e a radiação do bloco do motor para o ambiente.

Yoshida *et alii* [127] realizaram um estudo experimental dos fluxos de calor localizados em um motor diesel de pré-câmara, com a finalidade de obter a distribuição espacial de temperaturas. Eles apresentam também balanços das quantidades de calor em cada região de interesse no motor: cabeçote, coletor de escape, válvulas e pré-câmara.

As tensões térmicas produzidas nas partes metálicas do motor podem ser avaliadas através de métodos de elementos finitos que produzem a distribuição de temperaturas no bloco, no pistão e no cabeçote. Wu e Knapp [128] empregaram esta metodologia para analisar diferentes configurações de cabeçotes e formatos de galerias de refrigeração no cabeçote. Para isto, porém, as temperaturas superficiais e os coeficientes de película foram assumidos conhecidos.

Algumas tentativas de resolver o problema da transmissão de calor pelo método de elementos finitos têm surgido. Todavia, apenas modelos bi-dimensionais foram tratados e sempre envolvendo grandes simplificações quanto à combustão e a propriedades termodinâmicas e de transporte. Um exemplo deste tipo de abordagem é dado na ref. [129]

A forma usual de se suplantam as dificuldades mencionadas acima, e que tem sido seguida pela maioria dos trabalhos em simulação de motores, consiste em se adotar a hipótese de regime quase-permanente, com um coeficiente de película instantâneo para a transmissão de calor entre os gases e as paredes, obtido a partir de correlações empíricas ou semi-empíricas.

Nos modelos globais de transmissão de calor instantânea em motores de combustão interna é admitido um regime quase-permanente, isto é, supõe-se válida em cada instante a expressão:

$$q = h A(\theta) [T(\theta) - T_w] \quad (4.16)$$

que relaciona, através de um coeficiente de película h , a taxa de transmissão de calor com a área de troca instantânea e com a diferença de temperaturas entre as paredes e o gás.

Dada a natureza transitória do fenômeno, na verdade há uma defasagem entre a diferença de temperaturas e o fluxo de calor [130]. Pelo mesmo motivo, a temperatura de parede num dado local também não é constante, mas varia ciclicamente. Do ponto de vista prático, como o objetivo do modelamento é obter a quantidade de calor rejeitada para a água de refrigeração por ciclo, a defasagem instantânea entre a força motriz da transmissão de calor - diferença de temperaturas - e o fluxo de calor não é um fator fundamental. Da mesma forma, a variação da temperatura de parede - de alguns graus apenas - pode ser ignorada na maioria dos casos.

A área de transferência de calor é variável, devido ao movimento do pistão. Como temperatura de parede, pode ser adotado um valor constante para toda a câmara ou para partes dela - para o topo do pistão, para as paredes do cilindro, para o cabeçote, etc.

A escolha de uma correlação para o coeficiente de película a adotar não é uma questão trivial. Por um lado, todas as expressões possuem coeficientes empíricos de ajuste. Por outro lado, apenas resultados experimentais poderiam ser empregados para o ajuste de parâmetros ou mesmo para se verificar qual - ou quais - correlações melhor se adaptariam a um motor em particular. Na literatura específica sobre simulação de desempenho de motores há

um número bastante expressivo de correlações para o coeficiente de película que são utilizadas com frequência. A fim de optar por uma dessas correlações, foi feito um estudo comparativo das características de cada uma das seguintes correlações: de Nusselt [131], de Brillling [123], de Van Tyen [123], de Eichelbeg [132], de Annand [133], de Woschni [134], de Sitkei [135] e de Hohenberg [136], que são expressões gerais, e de Nishiwaki [137], que apresenta expressões específicas para os processos de admissão e de escape. Este estudo comparativo foi publicado pelo autor [138].

As correlações de Nusselt, Brillling, Van Tyen e Eichelberg são totalmente empíricas. O coeficiente de película é estimado como uma função da pressão e da temperaturas instantâneas dos gases e da velocidade média do pistão, dada por:

$$V_p = 2 L \Omega \quad (4.17)$$

onde Ω é a velocidade angular do motor em rotações/s. A velocidade média do pistão é a forma indireta de se considerar o efeito da turbulência que ocorre no motor.

As correlações de Nusselt, Brillling, Van Tyen e Eichelberg são, respectivamente:

$$h = C_1 (1 + 1,24 V_p) (P^2 T)^{1/3} + \frac{C_2}{(1/\epsilon + 1/\epsilon_w - 1)} \frac{(T/100)^4 - (T_w/100)^4}{(T - T_w)} \quad (4.18)$$

$$h = C_1 (3,5 + 0,185 V_p) (P^2 T)^{1/3} \quad (4.19)$$

$$h = C_1 (3,22 + 0,864 V_p) (P^2 T)^{1/3} \quad (4.20)$$

$$h = C_1 V_p^{1/3} (PT)^{1/2} \quad (4.21)$$

O coeficiente C_1 que aparece em todas as expressões acima (e nas seguintes também) é uma constante que deve ser ajustada para cada motor. O segundo membro da correlação de Nusselt é um coeficiente de película equivalente que considera a radiação térmica. Nesse termo, ϵ e ϵ_w são as emissividades do gás e das paredes. As

expressões de Brillling e Van Tyen apresentadas acima são alterações referentes apenas ao termo convectivo da expressão de Nusselt.

Partindo da análise dimensional, vários autores sugerem uma correlação para o número de Nusselt semelhante à dos modelos de convecção forçada em regime turbulento:

$$Nu = Cte Re^n \quad (4.22)$$

Após criticar as relações que são puramente empíricas, Annand propos a seguinte expressão para o coeficiente de película, baseada na análise dimensional:

$$h = C_1 k/D Re^{0,7} + \frac{C_2 (T^4 - T_w^4)}{(T - T_w)} \quad (4.23)$$

com o número de Reynolds definido por

$$Re = \rho V_p D / \mu \quad (4.24)$$

onde k , ρ e μ representam a condutibilidade térmica, a densidade e a viscosidade dinâmica instantâneas dos gases. Assim como Nusselt, Annand acrescenta ao termo convectivo um termo que representa a radiação térmica.

Utilizando a mesma conceituação, Woschni desenvolveu uma expressão para o coeficiente de película explicitando, a partir do número de Reynolds, as influências do tamanho do motor (D), da pressão e da temperatura instantâneas. Além disso, alterou a velocidade característica para uma função que depende não só da velocidade média do pistão mas também do aumento de turbulência causada pela combustão:

$$h = C_1 D^{-0,2} P^{0,8} T^{-0,58} \left[C_2 V_p + C_3 \frac{V_s T_1}{P_1 V_1} (P - P_o) \right]^{0,8} \quad (4.25)$$

onde T_1 , P_1 e V_1 são relativos a algum ponto conhecido do ciclo, V_s é a cilindrada do motor e P_o é a pressão instantânea obtida com o motor acionado quando não há combustão. É claro que P coincide com P_o na admissão e na compressão, afasta-se fortemente du-

rante a combustão e tende novamente a P_0 ao fim da expansão. Nesta formulação, a radiação é considerada de forma implícita.

Também partindo da análise dimensional, Sitkei propôs:

$$h = C_1 (1+b) P^{0,7} V_p^{0,7} T^{-0,2} d_e^{-0,3} \quad (4.26)$$

onde b é uma constante adimensional para considerar o tipo de câmara de combustão e d_e é um diâmetro equivalente definido como:

$$d_e = 4 V / A \quad (4.27)$$

Reverendo o trabalho de Woschni, Hohenberg modificou aquela expressão, abandonando o termo da velocidade característica dependente da combustão e trabalhando com o volume instantâneo como dimensão característica:

$$h = C_1 V^{-0,06} P^{0,8} T^{-0,4} (V_p + C_2)^{0,8} \quad (4.28)$$

Nishiwaki, percebendo a falta de correlações empíricas desenvolvidas especificamente para os processos de admissão e exaustão, e considerando a importância desses processos para a previsão do rendimento volumétrico e da temperatura de escape, propôs, para o processo de admissão e exaustão, respectivamente:

$$h = C_1 D^{-0,198} (V_p P)^{0,807} T^{-0,534} \quad (4.29)$$

$$h = C_1 D^{-0,422} (V_p P)^{0,578} T^{-0,199} \quad (4.30)$$

As expressões (4.23) a (4.30) obedecem à equação (4.22). Apesar de existirem métodos para a determinação correta das propriedades de transporte [139], dada a natureza semi-empírica das correlações, frequentemente se adotam aproximações para k e μ :

$$k = C_1 T^{0,69} \quad (4.31)$$

$$\mu = C_1 T^{0,645} \quad (4.32)$$

Deve-se lembrar que algumas das correlações trazem implicitamente o efeito da radiação; é o caso das expressões de Eichelberg, Woschni, Hohenberg e Nishiwaki. As demais consideram esse efeito separadamente, definindo um coeficiente de película equivalente para a radiação térmica. A radiação térmica é mais relevante em motores de ignição por compressão, onde há a presença de chamas de difusão e nuvens de material particulado que constituem um meio participante. Nos motores de ignição por centelha, a chama é muito menos luminosa pois a mistura é homogênea; além disso, praticamente não há formação de particulados e, dos gases presentes, apenas a água e o gás carbônico são relevantes para a radiação [140]. Patterson [23] mostra que para motores a gasolina a radiação térmica, mesmo durante a combustão, não chega a representar 10 % do total do calor transmitido.

Uma comparação entre as estruturas das diversas correlações pode ser vista na Tabela 4.1. As quatro primeiras expressões são puramente empíricas, obtidas através de análise dos dados experimentais de motores particulares e não consideram o efeito da dimensão do motor. As demais foram obtidas também a partir de dados

Tabela 4.1 - Comparação entre as correlações para os coeficientes de película

Correlação	Pressão	Temp.	Dimensão	Velocidade
Nusselt	$P^{0,667}$	$T^{0,333}$	—	$(1+1,24V_p)$
Brillling	$P^{0,667}$	$T^{0,333}$	—	$(3,5+0,185V_p)$
Van Tyen	$P^{0,667}$	$T^{0,333}$	—	$(3,22+0,864V_p)$
Eichelberg	$P^{0,5}$	$T^{0,5}$	—	$V_p^{0,333}$
Annand	$P^{0,7}$	$T^{-0,384}$	$D^{-0,3}$	$V_p^{0,7}$
Woschni	$P^{0,8}$	$T^{-0,53}$	$D^{-0,2}$	$[aV_p+b(P-P_o)]^{0,8}$
Sitkei	$P^{0,7}$	$T^{-0,2}$	$(4V/A)^{-0,3}$	$(1+b) V_p^{0,7}$
Hohenberg	$P^{0,8}$	$T^{-0,4}$	$V^{-0,06}$	$(V_p + a)^{0,8}$
Nish. Adm.	$P^{0,807}$	$T^{-0,807}$	$D^{-0,193}$	$V_p^{0,807}$
Nish. Exa.	$P^{0,578}$	$T^{-0,400}$	$D^{-0,422}$	$V_p^{0,578}$

experimentais, mas obedecendo a relação expressa na equação (4.22). Há uma grande discrepância entre as expressões puramente experimentais e as semi-empíricas quando se verifica o efeito da temperatura: num caso é previsto um aumento do coeficiente de película com a temperatura e no outro caso o inverso. Todas as expressões empregam a velocidade média do pistão V_p como medida do grau de turbulência.

Os resultados obtidos na análise comparativa entre as diversas expressões para o coeficiente de película estão apresentados no Apêndice 3. Uma avaliação dos resultados obtidos permite observar que:

- Correlação de Brillling fornece sempre valores muito baixos.
- Correlações de Nusselt e Van Tyen fornecem valores muito baixos quando a velocidade média do pistão é pequena.
- Correlação de Eichelberg - bons resultados são obtidos para velocidades médias de pistão pequenas, piorando progressivamente quando aumenta a velocidade média do pistão.
- Correlação de Woschni possui os inconvenientes de requerer o conhecimento prévio do diagrama indicador ($P \times V$) e possuir uma descontinuidade entre os processos de admissão/compressão e expansão/exaustão (muda o valor da constante C_2).
- As demais correlações - Annand, Hohenberg e Sitkei - são razoáveis, com vantagens e desvantagens em alguns processos
- As correlações de Nishiwaki são recomendadas para os processos de admissão e de exaustão.

Com base na avaliação das características de cada correlação optou-se pela expressão de Hohenberg - que é recente (1979) e ao mesmo tempo simples quando comparada às demais - durante a fase fechada do ciclo. Para a fase aberta do ciclo, isto é, a admissão e a exaustão, foram utilizadas as correlações de Nishiwaki. Como forma de compatibilizar de forma suave a passagem de uma expressão para a outra, adotou-se uma ponderação entre os dois valores durante um período de 30° em torno de cada transição.

Há outras abordagens que consideram a existência de uma camada limite térmica, variável no tempo e uma região central adiabática [141]. Todavia, a complexidade desta solução não implica em valores substancialmente melhores ou piores do que a metodologia aqui empregada, exceto quando se trata de calcular a formação de

poluentes pelo motor - que não é o caso.

4.4 - O PROCESSO DE COMBUSTÃO

Uma das questões mais complexas no modelamento de um motor de combustão interna é a abordagem do fenômeno da combustão. Por se tratar de um processo transitório, em regime de escoamento turbulento e ocorrendo em geometrias complexas como as câmaras de combustão normalmente apresentam, não há ainda formas de modelamento que considerem todas as condições reais. Também neste aspecto não há possibilidade de se empregar modelos tridimensionais em que as equações diferenciais que regem o problema possam ser resolvidas. Assim, mesmo os mais experientes autores [1,120,142] são unânimes em afirmar que o problema de modelamento da combustão deve ser tratado de forma pragmática, combinando conhecimento básico com relações empíricas ou parâmetros a serem ajustados com base em dados experimentais.

De forma geral, pode-se separar os modelos de simulação da combustão em dois grupos básicos: os de caráter analítico e os de caráter preditivo. A primeira abordagem, cujo exemplo clássico é o trabalho de Krieger e Borman [143], obtém a taxa de liberação de energia pela combustão através do diagrama $P \times V$ real medido no motor, para cada condição de operação desejada, por um balanço da primeira lei da termodinâmica. Com base no diagrama da taxa de liberação de energia assim obtido, pode-se analisar as características da combustão. Vários trabalhos de modelamento empregam esta metodologia [144 - 148]. A outra abordagem procura, através das mais variadas estratégias de modelamento, prever o diagrama $P \times V$; todavia, sempre é necessário se ter resultados experimentais para a validação do modelo e para a definição de parâmetros de ajuste, ao menos para uma condição de operação. Com o modelo ajustado ao motor em estudo, pode-se prever o comportamento desse motor em outras condições de operação distintas das condições para as quais o modelo foi ajustado.

O modelamento da combustão nos motores diesel é mais complexo do que no caso dos motores de ignição por centelha, uma vez que a combustão ocorre em uma mistura heterogênea: há regiões

onde existe apenas ar, outras em que só há combustível e outras em que a mistura ar-combustível se encontra em variados graus de enriquecimento. Uma das primeiras formas de prever a taxa de liberação de energia durante a combustão foi proposta por Lyn [149]. Ele propôs formas geométricas simples para a taxa de liberação de calor normalizada, como triângulos e retângulos, e verificou o efeito do ponto de injeção, da duração da combustão e do formato do triângulo sobre o diagrama $P \times V$, o rendimento térmico, a pressão máxima e a taxa de aumento de pressão. Simultaneamente, a partir de resultados experimentais, Austen e Lyn [150] relacionaram o formato da taxa de liberação de calor com as características do sistema de injeção, a fim de conseguir otimizar o último a partir das características desejadas quanto ao formato da curva da taxa de liberação de calor. A perspectiva de adotar uma forma pré-definida para a taxa de liberação de calor para motores diesel foi melhorada quando, em 1985, Miyamoto et alii [151] adotaram uma combinação de duas funções de Wiebe (descrita em detalhes adiante) para ajustar a curva da taxa de liberação de calor, que tem uma forma bastante característica, como mostrado esquematicamente na Figura 4.4.

Outra abordagem que tem sido bastante empregada em motores de ignição por compressão está baseada no trabalho de Whitehouse e Way [152]. Trata-se de uma formulação semi-empírica, baseada na velocidade de injeção de combustível na câmara e na quantidade de oxigênio disponível para a queima; os autores definem uma taxa de preparação de mistura e uma taxa de queima que depende da primeira. No início do processo ocorre um período de indução, com a taxa de preparação de mistura maior do que a taxa de queima. Em seguida, a mistura já preparada entra em rápida combustão, causando o primeiro pico observado na figura 4.4. O resto do processo de combustão é controlado pela velocidade de preparação da mistura, que passa a ser a etapa limitante. Shroff e Hodgetts [153] acrescentam à formulação de Whitehouse um termo de velocidade característica de turbulência, que depende dos processos de admissão, escape, combustão, injeção de combustível e da dissipação viscosa. Outro exemplo da aplicação desta metodologia pode ser visto na ref. [154].

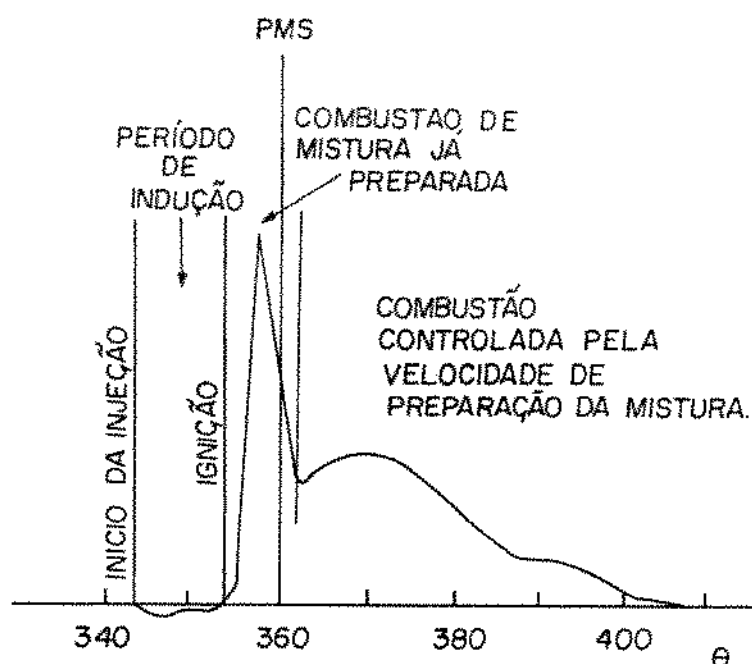


Figura 4.4 - A taxa de liberação de energia típica em um motor diesel

Mais recentemente têm sido propostos modelos que consideram o *spray* de combustível na câmara e sua interação com o ar, seja em câmaras quiescentes (ou de baixa turbulência), seja em câmaras com alto grau de turbulência. Um modelo de duas zonas foi empregado por Kumar *et alii* [155] para modelar um motor diesel de média rotação.

Para poder analisar a formação de poluentes em motores de ignição por compressão, especialmente quanto à emissão de particulados, têm sido propostos modelos estocásticos para a mistura entre o ar e o combustível injetado. Nas referências [156-158] é adotado um modelo de Monte Carlo de coalescência-dispersão para a mistura que considera a mistura turbulenta e molecular. De forma sintética, dada uma função de distribuição inicial, o modelo ava-

lia a evolução dessa função no tempo como resultado dos processos de mistura molecular e turbulenta, de evaporação do combustível, de reações químicas, etc.

No caso dos motores de ignição por centelha, a combustão ocorre em uma mistura homogênea de ar e combustível. Embora essa característica elimine alguns dos problemas que ocorrem na combustão diesel (presença de gotas líquidas a serem evaporadas, como modelar o processo de mistura entre o ar e o combustível e a distribuição espacial de regiões com diferentes propriedades), ainda assim o modelamento do processo de combustão é bastante difícil. Edwards e Teague [159] apresentaram um trabalho onde são discutidas qualitativamente as reações que ocorrem antes da ignição (pirólise de baixas temperaturas, oxidação lenta e chamas frias), bem como as chamadas reações "pós-chama" (recombinação, oxidação do CO, pirólise dos hidrocarbonetos remanescentes) e os efeitos de parede, que diminuem drasticamente a velocidade das reações e fazem com que até a saída dos gases de escape para a atmosfera existam reações se processando.

Dentro da perspectiva de modelos de caráter preditivo, pode-se identificar três estratégias de simulação bastante empregadas e distintas: a primeira consiste em assumir um perfil da velocidade de queima; a segunda, em modelar a velocidade de propagação de uma chama através da câmara; a última incorpora modelos simplificados de turbulência e velocidade de propagação de chama.

A metodologia de assumir um perfil conhecido para a taxa de liberação de calor na combustão é a mais simples. Tem sido empregados perfis compostos por trechos com velocidade de liberação de calor constante [112], perfis triangulares [160], perfis senoidais [161] e perfis que empregam a função de Wiebe [115]. As expressões de cada uma destas formas são, respectivamente:

$$\frac{dX}{d\theta} = \begin{cases} C_1 & p / \theta \leq \theta_1 \\ C_2 & p / \theta_1 \leq \theta \leq \theta_2 \\ C_1 & p / \theta_2 \leq \theta \end{cases} \quad C_1 < C_2 \quad (4.33)$$

$$\frac{dX}{d\theta} = \begin{cases} C_1 \theta & p / \theta \leq \theta_1 \\ -C_1 \theta & p / \theta_1 \leq \theta \end{cases} \quad (4.34)$$

$$\frac{dX}{d\theta} = \frac{\pi}{2 \Delta\theta_b} \operatorname{sen} \left[\pi \left(\frac{\theta - \theta_f}{\Delta\theta_b} \right) \right] \quad (4.35)$$

$$\frac{dX}{d\theta} = a (m+1) \left(\frac{\theta - \theta_f}{\Delta\theta_b} \right)^m \exp \left[-a \left(\frac{\theta - \theta_f}{\Delta\theta_b} \right)^{m+1} \right] \quad (4.36)$$

onde C_1 são constantes, $\Delta\theta_b$ é a duração da combustão em graus e θ_f é o ângulo de início da combustão. Cumpre ressaltar que a função de Wiebe não representa apenas mais uma expressão conveniente, mas foi obtida a partir de noções básicas da teoria de reações em cadeia [162].

A estratégia mais frequente para a simulação da combustão em motores de ignição por centelha emprega o conceito de velocidade de chama. A taxa de massa que queima é relacionada com a velocidade de chama turbulenta por:

$$\frac{dm}{dt} = \rho_u A_f S_t \quad (4.37)$$

onde ρ_u é a densidade da mistura não queimada, A_f é a área da frente de chama e S_t é a velocidade de propagação de chama turbulenta.

Muitos estudos experimentais sobre a velocidade de chama laminar foram realizados em misturas ar-combustível queimando em regime permanente e é possível se obter diversas correlações empíricas bastante boas [109, 115]. Todavia, a queima em um motor não ocorre em regime permanente e nem laminar; para relacionar a velocidade de chama laminar com a turbulenta, algumas hipóteses são necessárias. Em geral, é assumida alguma relação funcional entre elas:

$$S_t = f(S_l) \quad (4.38)$$

onde S_l é a velocidade de chama laminar para um processo em re-

gime permanente. Alguns autores [110] assumem uma relação linear, outros utilizam o número de Reynolds [109] e outros ainda adotam coeficientes experimentais para tal função [107, 111, 163]. Em todos os casos acima, deve-se ajustar valores de constantes para cada motor em particular.

A área da frente de chama é assumida como esférica a partir da vela, e truncada ao evoluir quando atinge as fronteiras sólidas que constituem as paredes da câmara. Apesar de que as evidências experimentais mostrem que a chama se distorce por efeito da turbulência, esse efeito não é considerado de forma explícita, mas acaba sendo incorporado no ajuste que se faz da velocidade de chama.

Um passo além foi dado por Annand [164], ao constatar que havia fortes indícios de que a combustão não se encerrava após a passagem da chama. O método por ele proposto adota o modelo de propagação esférica de chama mas incorpora equações de cinética química para representar a principal reação pós-chama, em uma zona de reação secundária.

Uma tentativa de incluir a turbulência interna ao motor na formulação de um modelo de propagação da frente de chama foi realizada por Tabaczynski et alii [165]. A partir de hipóteses sobre a estrutura da turbulência no instante em que a faísca ocorre, o modelo é capaz de prever as tendências da duração da combustão e do período de indução, desde que alguns parâmetros sejam ajustados experimentalmente. Este modelo não emprega a velocidade de propagação turbulenta como os anteriores; a intensidade e a estrutura da turbulência são combinadas com a velocidade de propagação laminar para produzir uma velocidade de queima resultante. Em um trabalho posterior, Hires et alii [166] estendem a formulação a fim de obter expressões explícitas para o período de indução e para a duração da combustão. Morel et alii [167] adotam essa metodologia em um trabalho em que o formato da câmara de combustão é considerado explicitamente, como na ref. [114].

As formulações descritas até aqui não são capazes de prever os distúrbios da combustão, como o aparecimento da detonação ou a pré-ignição causada por pontos quentes. Algumas tentativas de se prever a ocorrência da detonação foram feitas. Strange [107] apresenta uma integral que vai sendo calculada para a parte da mistu-

ra não queimada à medida que a combustão vai se desenvolvendo. Para cada motor, existe um valor máximo que essa integral pode assumir sem que ocorra a detonação; uma vez obtido esse valor para uma dada condição de operação, ele passa a ser um indicador da possibilidade de ocorrência da detonação para as demais condições de operação que sejam simuladas. Outra abordagem, mais fundamental, é apresentada por Hirst e Kirsch [168]. Eles adotam um modelo de cinética global que considera o hidrocarboneto, o oxigênio, os intermediários de ramificação de cadeia, os radicais totais e os intermediários que interrompem a cadeia. O modelo simula a combustão até que ocorra a detonação e os resultados obtidos (previsão do ângulo de virabrequim em que irá ocorrer a detonação) para combustíveis de referência são muito bons. Após iniciada a detonação, não há modelos que sejam capazes de prever as flutuações de pressão típicas que são mostradas no diagrama indicador obtido experimentalmente.

Para uma revisão completa dos modelos de simulação da combustão, tanto para motores de ignição por centelha como para motores de ignição por compressão e motores experimentais de carga estratificada, as referências [115, 169, 170 e 171] são recomendadas.

A estratégia para o modelamento da combustão empregada neste trabalho foi a de adotar uma função de Wiebe. O mecanismo de propagação da combustão ainda não é claro, isto é, a sequência de transformações desde o gás não queimado até o gás queimado, através de uma reação em cadeia e com a presença de muitos reagentes intermediários não é ainda conhecida. Dessa forma, o significado físico do conceito de velocidade de queima turbulenta descrito acima é ainda ambíguo no presente [172]. Além disso, a hipótese de que a frente de chama se propague segundo uma esfera em expansão também é uma aproximação. Por outro lado, o modelo de turbulência combinado com a velocidade de chama laminar [165] requer que se estime a intensidade de turbulência no instante da centelha, para a geometria particular do motor em questão. Assim, considerando as observações acima e os objetivos deste trabalho, a opção por um modelo em que o perfil da taxa de liberação de calor seja definido por uma função ajustável é razoável e conveniente.

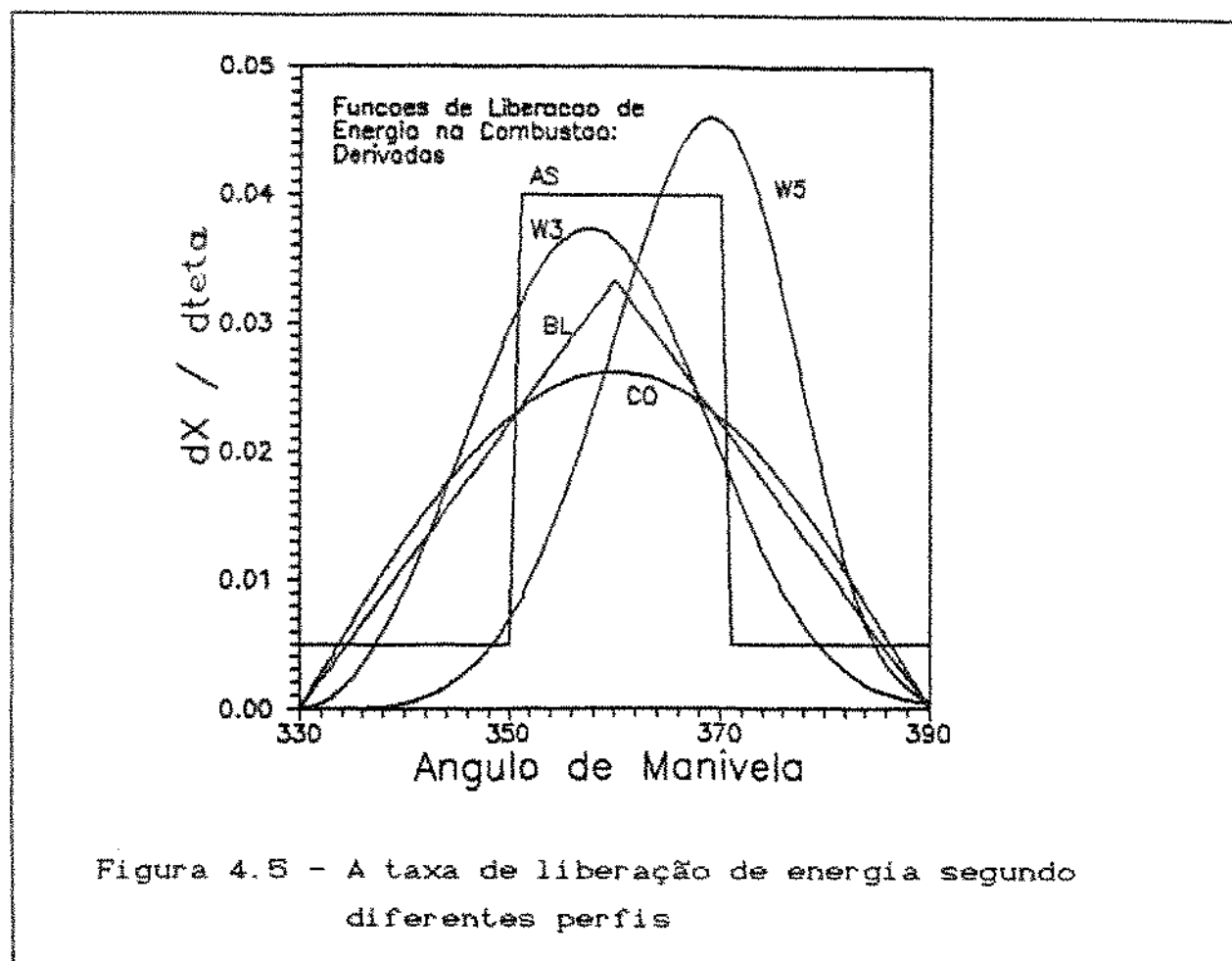
Uma vez que o modelo de simulação construído não trabalha com equações diferenciais, mas adota um procedimento passo a passo, a função de Wiebe foi empregada em sua versão integral:

$$X = 1 - \exp \left[-a \left(\frac{\theta - \theta_i}{\Delta\theta_b} \right)^{m+1} \right] \quad (4.39)$$

Através de uma escolha criteriosa do parâmetro de duração da combustão $\Delta\theta_b$ e do parâmetro de velocidade de queima $(m+1)$ é possível usar o mesmo procedimento para diferentes condições de operação de um motor ou para diferentes motores. O parâmetro a da expressão acima é chamado de parâmetro de eficiência da combustão e seu valor afeta a quantidade de combustível que já queimou quando $(\theta - \theta_i)$ é igual a $\Delta\theta_b$. Foi assumido como 6,9078 no presente estudo, correspondendo a uma eficiência de combustão de 99,9 % - ou seja, X é 0,999000 quando $(\theta - \theta_i)$ é igual a $\Delta\theta_b$.

O ângulo em que se inicia a centelha - e que é chamado de ponto de ignição - não coincide com o ângulo de início da combustão θ_i que aparece na função de Wiebe. Uma vez ajustados os parâmetros e conhecido o ângulo em que ocorre a centelha, o atraso de ignição pode ser estimado. Inversamente, conhecido o ângulo físico em que se inicia a faísca, e através de alguma correlação para o período de indução, é possível ajustar θ_i . Na referência [173] são apresentados os intervalos de tempo associados ao período de indução, ao ponto de 10 % de massa queimada, ao ponto de maior taxa de liberação de energia e à duração total da combustão, para a gasolina, o propano, o etanol e o metanol em diferentes condições de operação - ponto de ignição, relação ar-combustível - para um motor operando em carga parcial.

O apêndice 4 mostra alguns resultados do emprego da função de Wiebe, bem como o que ocorre com o perfil da curva quando os parâmetros da função são variados. Apenas como exemplo, a figura 4.5 mostra a aplicação das funções expressas nas equações (4.33) a (4.35) ao lado da função de Wiebe, para uma mesma duração e início de combustão. Nessa figura, AS, BL, CO, W3 e W5 significam Asanuma [112] - eq.(4.33), Blair [160] - eq.(4.34), perfil cossenoidal - eq.(4.35), Wiebe [115] com fator de forma 3 e com fator de forma 5.



4.5 - A FASE FECHADA DO CICLO

Em um motor real, devido ao vazamento de gases pela folga dos anéis para o cárter - fenômeno conhecido como *Blow-by* - não há, do ponto de vista termodinâmico, uma fase fechada. Todavia, para um motor em bom estado de conservação, o fluxo de massa de gases para o cárter é bastante baixo. Desde que se conheçam algumas características de um dado motor, pode-se estimar o fluxo de massa de gases que escapam do cilindro passo a passo durante a evolução simulada de um ciclo de trabalho, como indicado na referência [161]. Neste trabalho o *Blow-by* não é considerado.

Para a simulação dos processos de compressão e expansão, foi gerado um procedimento passo a passo, a partir das condições iniciais de pressão, temperatura e composição instantânea do

fluido operante. É dado um pequeno incremento no ângulo de manivela, calculado o novo volume pela equação (4.9) e, iterativamente, a pressão e temperatura correspondentes. Durante a compressão a composição dos gases não varia mas na expansão, desde que a temperatura seja superior a 700 K, ocorre dissociação ou recombinação dos produtos de combustão segundo as reações de equilíbrio químico. Os valores finais dessas grandezas são alcançados quando é satisfeita a primeira lei da termodinâmica para um sistema fechado:

$$\delta Q = U_f - U_i + \delta W \quad (4.40)$$

Os valores de energia interna para a mistura de gases provém da sub-rotina de determinação de propriedades termodinâmicas descrita no Capítulo 3. O elemento de transmissão de calor no intervalo é obtido pelo procedimento já analisado e para o elemento de trabalho usa-se a aproximação:

$$\delta W = (V_f - V_i)(P_f + P_i) / 2 \quad (4.41)$$

Para modelar a combustão, novamente se empregou um procedimento passo a passo, mas agora cada passo foi dividido em seis etapas:

- combustão a pressão constante da fração de massa que queima no intervalo
- mistura a pressão constante da fração recém-queimada com os gases queimados anteriormente
- reajuste do volume total para o valor inicial
- incremento de ângulo, com a consequente variação de volume
- transmissão de calor a volume constante
- reajuste de pressão e verificação da primeira lei.

Os três primeiros passos correspondem a queima de uma parcela de massa de mistura em um processo em que o volume total seja constante. A metodologia empregada permite que se obtenham os valores de temperatura da região de mistura queimada e não queimada e pressupõe a igualdade de pressões entre essas regiões na combustão normal (sem detonação).

No Apêndice 5 são fornecidos os fluxogramas da compressão, da combustão e da expansão, que ajudam a compreender a lógica do programa simulador.

4.6 - O ESCOAMENTO ATRAVÉS DAS VÁLVULAS

O escoamento através das válvulas é um fenômeno transitório, cuja força motriz é a diferença de pressões instantânea entre o cilindro e o coletor (de admissão ou de escape). Também a área disponível varia no tempo em função da elevação da válvula.

Em um estudo associado ao desempenho de válvulas cardíacas, Yellin e Peskin [174] analisaram um escoamento pulsátil, em que a diferença de pressões a montante e a jusante era senoidal. Apesar de constatar uma ligeira defasagem entre a força motriz do escoamento e o fluxo de massa, todos os dados experimentais - independente da frequência, da amplitude e do diâmetro do orifício - mostraram que o escoamento podia ser tratado como quase-permanente. Embora no trabalho citado se trate de um fluido incompressível e as frequências estudadas serem bem mais baixas do que em motores de combustão interna, observou-se que o modelo de regime quase-permanente é adequado.

O procedimento usual [110 - 115], [122], [144 - 148], [153 - 158] para se determinar o fluxo de massa através das válvulas admite um processo quase-permanente - ou seja, supõe-se que as equações para o regime permanente sejam válidas a cada instante - com a hipótese de escoamento isentrópico modificada por um coeficiente de descarga C_d definido por:

$$C_d = \frac{\dot{m}_{\text{real}}}{\dot{m}_{\text{isentr.}}} \quad (4.42)$$

Seja um volume de controle entre uma seção a montante e a seção de área mínima para o escoamento, tal como esboçado na Figura 4.6. Considerando um processo isentrópico em regime permanente entre as seções 1 e 2, em que as variações de energia potencial sejam desprezíveis, a primeira lei da termodinâmica

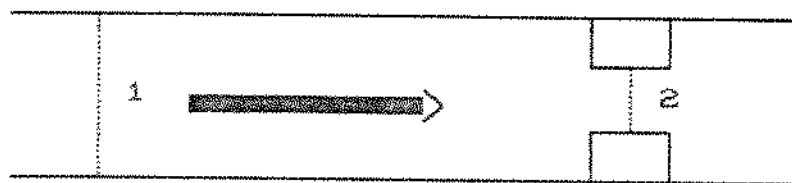


Figura 4.6 - Um volume de controle para o escoamento

pode ser escrita como:

$$h_1 + \frac{C_1^2}{2} = h_2 + \frac{C_2^2}{2} \quad (4.43)$$

e então, considerando ainda que o fluido é um gás ideal

$$C_2 = \sqrt{2 c_p (T_1 - T_2) + C_1^2} \quad (4.44)$$

O fluxo de massa deve ser o mesmo, tanto para a seção 1 como para a seção 2:

$$\dot{m}_{\text{isoent}} = \rho_2 A_2 C_2 = \rho_1 A_1 C_1 \quad (4.45)$$

Agora, escrevendo a densidade na seção 2 a partir da densidade na seção 1:

$$\rho_2 = \rho_1 \frac{P_2 T_1}{P_1 T_2} = \frac{P_1}{R T_1} \frac{P_2 T_1}{P_1 T_2} \quad (4.46)$$

Para um gás ideal,

$$\left. \begin{aligned} c_p - c_v &= R \\ c_p / c_v &= \gamma \end{aligned} \right\} \rightarrow \frac{c_p}{R} = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \quad (4.47)$$

Além disso, em um processo isentrópico:

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{(\gamma-1)/\gamma} \quad (4.48)$$

Substituindo as expressões (4.44) e (4.46) em (4.45) e considerando as equações (4.47) e (4.48), o fluxo de massa isentrópico pode ser escrito como

$$\dot{m}_{isent} = A_2 P_1 \left(\frac{2}{R T_1} \right)^{1/2} F \quad (4.49)$$

onde

$$F = \sqrt{\left(\frac{\gamma}{\gamma-1} \right) \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{2/\gamma} - \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{(\gamma+1)/\gamma} \right]} \quad (4.50)$$

e então, considerando a definição acima de coeficiente de descarga, a massa que efetivamente atravessa a válvula é:

$$\dot{m} = C_d A_2 P_1 \left(\frac{2}{R T_1} \right)^{1/2} F \quad (4.51)$$

Embora no desenvolvimento da expressão (4.49) tenha sido utilizada a pressão na seção de área mínima, a relação de pressões que é empregada no cálculo de F - eq.(4.50) - refere-se às pressões à montante e à jusante do estrangulamento do fluxo, uma vez que é muito difícil se obter a pressão exatamente na garganta. A diferença que isto induz na expressão do fluxo de massa isentrópico (4.49) é compensada pelo coeficiente de descarga C_d , que é obtido experimentalmente associado às pressões à montante e à jusante da área mínima. Este procedimento é análogo ao que se adota nos medidores de fluxo baseados em restrições ao escoamento - placas de orifício, bocais e tubos de Venturi.

O efeito de compressibilidade dos gases está incluído no fator F acima. A expressão (4.50) é válida desde que o número de Mach M seja menor do que a unidade - isto é, para o escoamento sub-sônico. Pode-se mostrar que a condição de número de Mach unitário na seção mínima do escoamento é dada por:

$$\frac{P_2}{P_1} \leq \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\gamma/(\gamma-1)} \quad (4.52)$$

Quando a relação de pressões é menor do que o valor crítico expresso pela equação (4.52), o escoamento na garganta é sônico e o fluxo de massa é limitado pela condição crítica. Nessa situação o fator F é:

$$F = \sqrt{\left(\frac{\gamma}{\gamma+1}\right) \left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{2/(\gamma-1)}} \quad (4.53)$$

No caso de uma válvula de admissão, raramente se obtém a condição crítica - ou seja, o escoamento em geral é subsônico. Para uma válvula de escape, porém, a condição crítica é sempre atingida no início do processo de exaustão, quando a pressão no cilindro é substancialmente maior do que a pressão no coletor de escape e a relação de pressões é menor do que a crítica. Nesses casos, em geral surgem ondas de choque à jusante da seção mínima do escoamento.

O coeficiente de descarga C_d é obtido experimentalmente. Huber e Brown [175] adotaram para o coeficiente de descarga valores obtidos especialmente para o motor que analisaram. O trabalho de Kastner *et alii* [176] é mais geral: mostrou que a hipótese de empregar num processo transitório os valores obtidos em um banco de ensaios para regime permanente não conduz a erros relevantes. Nesse trabalho, eles mostraram ainda que o coeficiente de descarga é fortemente influenciado pela elevação instantânea da válvula mas praticamente não depende da relação de pressão à montante e à jusante da válvula. Baseados em ensaios com diferentes relações de pressão e com válvulas de diferentes diâmetros, obtiveram uma curva única para o coeficiente de descarga como função do parâmetro adimensional Y/D já definido anteriormante.

Em um trabalho muito recente, Laforgia e Ficarella [177] determinaram experimentalmente coeficientes de área, definidos como a razão entre a área efetiva de garganta (que não coincide com a geométrica) e a área à montante - que também é uma medida de como o escoamento real se afasta do isentrópico associado. Embora os valores desse coeficiente sejam diferentes dos valores do coeficiente de descarga obtidos por Kastner, as mesmas características qualitativas foram observadas, isto é, o coeficiente de área depende apenas da elevação da válvula e não

da relação de pressões. Da mesma forma, a partir de ensaios com válvulas de diferentes tamanhos, determinaram um coeficiente válido para todas elas, desde que adimensionalizado.

Neste trabalho foi adotada a metodologia de Kastner, e os valores para o coeficiente de descarga foram obtidos através de um polinômio interpolador para os resultados presentes naquele estudo. No Apêndice 6 se mostra em detalhes os dados de Kastner, os resultados do polinômio interpolador e os erros percentuais obtidos. Uma vez que o coeficiente de descarga foi determinado para válvulas de admissão, para a válvula de escape - que tem um escoamento menos dirigido e portanto com mais atrito - foi admitido um coeficiente de descarga que é uma percentagem do de admissão. A área mínima de escoamento A_2 , bem como os valores da elevação instantânea da válvula são calculados conforme descrito no Apêndice 2.

4.7 - A FASE ABERTA DO CICLO

A fase aberta do ciclo é formada pelos processos de admissão e de escape. Em um motor de quatro tempos, a fase aberta determina não só a fração de gases residuais e o rendimento volumétrico, mas também o trabalho de bombeamento consumido.

Em um motor moderno de alta rotação, a válvula de escape começa a abrir (AVE) antes do final do curso de expansão, para aproveitar a pressão ainda elevada dentro do cilindro e iniciar a exaustão (exaustão espontânea - *Blow down*). Caso haja um retardo em AVE, durante o curso de descarga a pressão interna no cilindro irá aumentar e conseqüentemente o trabalho de bombeamento também. O fechamento da válvula de escape (FVE) ocorre após o ponto morto superior, já no curso de admissão, pois é necessário se ter uma elevação não muito pequena no fim do curso de escape sob pena de novamente a pressão no cilindro aumentar.

A válvula de admissão começa a abrir (AVA) um pouco antes do fim do curso de escape; dessa maneira evita-se que a pressão no interior do cilindro caia muito abaixo da pressão no coletor, aumentando o trabalho de bombeamento. Evidentemente, há um período em que as duas válvulas estão abertas simultaneamente: a de escape

pe ainda retornando à sua sede e a de admissão já se elevando. Este período é chamado de cruzamento de válvulas e pode variar bastante de caso a caso. Quando se pretende otimizar o rendimento volumétrico em altas rotações, o cruzamento de válvulas é grande e vice-versa. O fechamento da válvula de admissão (FVA) ocorre sempre após o ponto morto inferior, já no curso de compressão, pelos mesmos motivos já citados para FVE.

As pressões à montante e à jusante da área mínima definida pela válvula e que devem ser conhecidas para que se use a equação (4.51) dependem de qual válvula está operando e em que condição. Tanto nas válvulas de admissão como nas de escape pode ocorrer escoamento reverso ao esperado - isto é, pode haver retorno de gases para dentro do cilindro pela válvula de escape ou escape de gases do cilindro para o coletor de admissão através da válvula de admissão. Assim, os termos montante e jusante são definidos a partir da relação de pressões instantânea entre o cilindro e um coletor.

A pressão existente nos coletores é uma pressão pulsátil, devido à natureza periódica dos fenômenos de admissão e escape e devido a propagações de ondas nas tubulações que constituem os coletores. Há três abordagens diferentes para se tratar a pressão nos coletores: a hipótese de regime de pressões constantes, os métodos de "enchimento - esvaziamento" de coletores e o método das características para a resolução unidimensional das equações diferenciais parciais temporais.

Os métodos de "enchimento e esvaziamento" admitem que os coletores possuem volumes finitos, que podem acumular massa. A pressão e a temperatura dos coletores podem variar no tempo mas, para um dado instante, são consideradas constantes ao longo do coletor. Esta metodologia é adequada no caso de motores que possuem plenos de admissão e de escape, como é o caso de motores de dois tempos, diesel, turboalimentados. Para estes motores, há uma caixa de ar de admissão e o coletor de escape possui grande volume, o que acaba por caracterizar um coletor curto, onde o fenômeno de propagação de ondas de pressão é pouco relevante. Um exemplo de aplicação deste modelo pode ser encontrado na referência [178].

O método das características envolve a solução das equações

diferenciais do escoamento unidimensional em regime transitório. A pressão varia ponto a ponto ao longo do coletor e, para uma dada seção, também no tempo. As condições de contorno já estão definidas para todos os componentes relevantes presentes em um coletor: junções de tubos, variação brusca de seção, carburador, compressor, turbina e fronteira do motor. Esta abordagem localiza ressonâncias favoráveis e desfavoráveis ao rendimento volumétrico em função da rotação do motor: são bastante interessantes para o projeto de coletores e para analisar motores que possuam turboalimentadores que operam com pressão pulsada. Benson e Galloway [179] utilizaram este método para um motor diesel turboalimentado multicilíndrico. O primeiro autor, com outros colaboradores, analisou também o caso de motores de ignição por centelha de quatro tempos [110] e de dois tempos com admissão pelo cárter [180]. O caso de um motor de quatro tempos de pequena cilindrada foi também estudado por Ferrari [181]. Blair [160] estudou o caso de um pequeno motor de dois tempos com admissão pelo cárter. O método das características em sua aplicação para motores de combustão interna é descrito em detalhes por Benson em seu último livro [182], de 1984.

A hipótese que as pressões nos coletores de admissão e de escape são constantes é frequentemente considerada. Esta simplificação proporciona simulações rápidas e baratas e é tanto mais adequada quanto menores forem os efeitos de acumulação de massa nos coletores e da propagação de ondas de pressão. Tem sido extensamente adotada para estudos de motores turboalimentados, para a adequação e a escolha do turbo mais apropriado a um dado motor e até mesmo para a previsão de operação transitório de um motor turboalimentado (resposta do turbo a uma aceleração brusca do motor). Boa parte das referências já mencionadas adotam pressões constantes nos coletores: [113-114], [122], [144-146], [153-155].

Uma vez que não se dispunha neste trabalho de medidas experimentais acerca do comportamento das pressões dos coletores, foi adotada a hipótese de pressões constantes nos coletores de admissão e escape. O modelo de simulação desenvolvido poderá incorporar o método das características sem problemas, quando se dispuser de dados experimentais que o possam verificar.

Durante a fase aberta do ciclo, em cada passo são calculadas a vazão em massa pelas válvulas, a quantidade de calor trocada e o trabalho envolvido. A primeira lei da termodinâmica para um volume de controle em regime de escoamento uniforme e não permanente deve ser satisfeita:

$$\delta Q + \sum_v m_e h_e = \delta W + \sum_v m_s h_s + U_f - U_i \quad (4.54)$$

onde m_e e m_s são as massas que entram e saem do cilindro e as somatórias se estendem para todas as válvulas do motor. Evidentemente, por uma única válvula ou entra ou sai massa; durante o período de cruzamento de válvulas, todavia, é possível que por uma válvula esteja saindo massa e por outra esteja entrando.

Quando ocorre escoamento reverso através de uma válvula (*Back-flow*), os coeficientes de descarga são alterados: para uma válvula de admissão o coeficiente de descarga diminui e o inverso ocorre para uma de escape. No caso da válvula de escape, a ocorrência de escoamento reverso não muda a qualidade da mistura que está no cilindro: são gases queimados. No caso de uma válvula de admissão, ocorre o retorno de gases queimados para o coletor de admissão onde existe uma mistura ar-combustível. Neste trabalho admite-se que não ocorre a mistura entre os gases queimados que retornam e a mistura fresca. Os gases queimados são re-aspirados para o interior do cilindro quando cessa o escoamento reverso e só quando isto já ocorreu é que o motor começa a admitir a carga fresca. Esta hipótese evita que se necessite estabelecer um modelo de mistura entre os gases queimados e a massa de ar e combustível no coletor de admissão e fornece valores de rendimento volumétrico mais próximos dos efetivamente medidos [122].

Quando há escoamento normal pela válvula de escape, a temperatura a montante que deve ser utilizada na equação (4.50) é a temperatura instantânea dos gases dentro do cilindro. O mesmo ocorre para o escoamento reverso através da válvula de admissão. Quando ocorre escoamento reverso para a válvula de escape, a temperatura a montante foi assumida como a temperatura média ponderada pela massa resultante da expansão através da válvula durante o escoamento normal. Para o escoamento normal da válvula de admis-

são há dois casos a considerar: a aspiração de gases queimados e a aspiração de mistura ar-combustível fresca. No primeiro caso foi adotada uma temperatura média análoga à empregada no escape e no segundo caso, uma temperatura constante típica.

4.8 - A CONVERGÊNCIA GLOBAL DO MODELO DE SIMULAÇÃO

A partir de valores iniciais de pressão, temperatura, fração de gases residuais e relação ar-combustível estimados ou reais, o ciclo é percorrido através dos processos de compressão, combustão, expansão, exaustão e admissão. Quando se fecha a válvula de admissão são recalculadas a pressão, a temperatura e a fração de gases residuais e os novos valores são comparados aos assumidos anteriormente. Um procedimento numérico produz então os valores iniciais que serão usados no ciclo seguinte. Este procedimento é repetido até que os valores finais concordem com os iniciais, dentro de uma tolerância estabelecida a priori. Normalmente a convergência ocorre em quatro ou cinco iterações e a variável principal nesse processo de convergência é a fração de gases residuais que permanecem no cilindro.

Após a convergência do ciclo completo, já são conhecidas algumas grandezas: o trabalho total líquido (W_T) e a quantidade de calor global transmitida dos gases para as paredes (Q_L). Outras grandezas são então calculadas: o rendimento térmico indicado, a pressão média indicada, a potência indicada produzida (por cilindro) e o rendimento volumétrico:

$$\eta_i = \frac{W_T}{m_c \text{ PCI}} \quad (4.55)$$

$$P_{mi} = \frac{W_T}{V_{\max} - V_{\min}} \quad (4.56)$$

$$N_i = \frac{W_T \text{ Rpm}}{120} \quad (4.57)$$

$$\eta_v = \frac{m_{mi}}{m_{mi_0}} = \frac{(m_a + m_c)}{\rho_{mi_0} V_c} \quad (4.58)$$

Os valores acima podem ser comparados a valores experimentais, caso se disponha de um sistema de medição capaz de levantar o diagrama indicador do motor (diagrama de pressão contra volume) nas mesmas condições de operação.

Os valores indicados e os valores efetivos estão relacionados por um rendimento mecânico:

$$\eta_m = \frac{\eta_e}{\eta_i} = \frac{P_{me}}{P_{mi}} = \frac{N_e}{N_i} \quad (4.59)$$

A diferença entre as grandezas indicadas e efetivas são englobadas como atrito. Assim, define-se a pressão média de atrito e a potência de atrito:

$$P_{mf} = P_{mi} - P_{me} \quad (4.60)$$

$$N_f = N_i - N_e \quad (4.61)$$

Caso sejam medidas as grandezas efetivas, o rendimento mecânico pode ser determinado; inversamente, se a potência de atrito é estimada, o rendimento mecânico e as grandezas efetivas podem ser calculadas. A previsão da potência de atrito tem sido bastante estudada; Gish et alii [183] defendem que não há maneira segura de se determinar a potência de atrito além da própria definição: medir a potência efetiva e a indicada e usar a equação (4.61). Bishop [184] propôs várias expressões empíricas para as diversas componentes da potência de atrito: atrito do pistão, perdas de carga na admissão e escape, atrito em mancais, atrito no trem de acionamento de válvulas, etc. O atrito total é obtido pela soma dessas contribuições individuais. Embora reconhecendo as limitações de um procedimento desse tipo, Bishop argumenta que na maior parte dos casos, a previsão do atrito possui a mesma ordem de grandeza que os erros experimentais observados quando se determina a potência de atrito por acionamento do motor (*motoring*). Millington e Hartles [185], com base em grande quantidade de dados experimentais relativos a motores diesel, propuseram uma única expressão que representa razoavelmente bem a potência de atrito como uma função linear da rotação e quadrática com a velocidade média do pistão.

Apesar das expressões empíricas já mencionadas, neste trabalho adotou-se a Norma ABNT NBR-5477 [186] para se determinar o rendimento mecânico de um motor de ignição por centelha, modificada pela definição de potência de atrito a fim de eliminar a pressão média efetiva e usar a pressão média indicada. A expressão contante na Norma é:

$$\eta_m = \frac{1}{1 + \frac{(6,89 F1) - (F2 P_{me})}{P_{me}}} \quad (4.62)$$

onde F1 e F2 são funções da rotação

$$F1 = 16,3761 + 2,28629 \frac{Rpm}{1000} + 0,297053 \left(\frac{Rpm}{1000} \right)^2 \quad (4.63)$$

$$F2 = \left[5,44659 - 0,02495 \frac{Rpm}{1000} - 0,174376 \left(\frac{Rpm}{1000} \right)^2 \right] 10^{-2} \quad (4.64)$$

Da definição de rendimento mecânico da equação (4.59) combinada à equação (4.62):

$$\eta_m = \frac{P_{me}}{P_{mi}} = \frac{P_{me}}{P_{me} + (6,89 F1) - (F2 P_{me})} \quad (4.65)$$

de onde se conclui que os termos que estão no denominador devem ser iguais. Manipulando essa igualdade se obtém, para a pressão média efetiva:

$$P_{me} = \frac{P_{mi} - 6,89 F1}{1 - F2} \quad (4.66)$$

Como a pressão média efetiva foi calculada a partir da expressão para o rendimento mecânico, ela obedece ao critério da Norma ABNT e o rendimento mecânico calculado pela expressão (4.59) a partir de P_{me} e P_{mi} também. Assim todas as grandezas efetivas são estimadas a partir do rendimento mecânico dado pela hipótese da Norma.

Uma versão resumida deste Capítulo, que não incorpora a análise exergetica e nem os valores de grandezas efetivas, mas apresentando alguns resultados preliminares, se encontra publicada [187].

4.9 - A ANÁLISE EXERGETICA DE CADA PROCESSO E GLOBAL

Para poder realizar uma análise exergetica, é preciso determinar a irreversibilidade que ocorre em cada processo ou a global do sistema. A irreversibilidade pode ser obtida de duas maneiras: através de um balanço de exergia ou pelo Teorema de Gouy-Stodola, a partir da geração de entropia, tal como mostrado no Capítulo 2.

O balanço de exergia para um sistema fechado entre dois estados genéricos 1 e 2 pode ser escrito, em termos da irreversibilidade:

$$I = Ex_2 - Ex_1 - W_L + \sum_r Q_r \left(\frac{T_r - T_o}{T_r} \right) \quad (4.67)$$

onde o último termo do lado direito da equação é a exergia associada ao calor transmitido entre o sistema e um reservatório à temperatura T_r e W_L é o trabalho líquido disponível, ou seja, o trabalho desenvolvido menos o trabalho realizado contra a atmosfera:

$$W_L = W - W_{atm} = \int_1^2 (P - P_o) dV \quad (4.68)$$

Por outro lado, a irreversibilidade de um processo também pode ser calculada pelo Teorema de Gouy-Stodola:

$$I = T_o S_g = T_o \left[(S_2 - S_1) - \sum_r \frac{Q_r}{T_r} \right] \quad (4.69)$$

Evidentemente, a irreversibilidade calculada pelos dois caminhos deve ser a mesma e este fato foi usado como uma verificação dos resultados produzidos para cada processo pelo programa. Durante a fase fechada do ciclo (compressão, combustão, expansão) esta metodologia foi empregada a cada passo de cálculo, para cada um dos processos e para a fase fechada tomada em seu conjunto. Com tal procedimento é possível verificar se ocorrem erros pois, a somatória de irreversibilidades passo a passo deve coincidir com a obtida para um processo como um todo e a soma da dos processos deve ser igual à global da fase fechada.

A temperatura do reservatório T_r foi assumida como a temperatura das paredes do cilindro pois a força motriz da transmissão de calor calculada durante cada processo é a diferença de temperaturas entre o gás e as paredes.

Para um volume de controle o balanço de exergia pode ser escrito como

$$\dot{I} = \sum_r \dot{Q}_r \left(\frac{T_r - T_o}{T_r} \right) + \sum_e (\dot{m} \text{ exf}) - \sum_s (\dot{m} \text{ exf}) - \dot{W}_x - \dot{W}_{Lsc} - \frac{dEx}{dt} \quad (4.70)$$

onde $\dot{W}_x$ é a potência de eixo que cruza o volume de controle, $\dot{W}_{Lsc}$ é a potência líquida devida ao movimento da superfície de controle, exf é a exergia de escoamento por unidade de massa, as somatórias em e e em s referem-se às entradas e saídas de massa do volume de controle e Ex é a exergia armazenada dentro do volume de controle. As expressões para $\dot{W}_{Lsc}$, exf e Ex são, respectivamente:

$$\dot{W}_{Lsc} = P \frac{dV_{vc}}{dt} - P_o \frac{dV_{vc}}{dt} = (P - P_o) \frac{dV_{vc}}{dt} \quad (4.71)$$

$$\text{exf} = (h - h_o) - T_o(s - s_o) + \text{ex}^q \quad (4.72)$$

$$Ex = m \left[(u - u_o) + P_o(v - v_o) - T_o(s - s_o) + \text{ex}^q \right] \quad (4.73)$$

onde ex^q é a exergia química definida no Capítulo 2.

Pelo Teorema de Gouy-Stodola a taxa de irreversibilidade para um volume de controle é dada por

$$\dot{I} = T_o \left[\sum_s (\dot{m} s) - \sum_e (\dot{m} s) + \frac{dS_{vc}}{dt} - \sum_r \frac{\dot{Q}_r}{T_r} \right] \quad (4.74)$$

e, novamente, as expressões (4.74) e (4.70) podem ser verificadas uma contra a outra.

Durante a fase aberta de operação de um motor, existe sempre pelo menos uma válvula aberta. De acordo com o volume de controle escolhido, que coincide com a interface entre o gás e as paredes,

não há trabalho de eixo cruzando as fronteiras. Além disso, há um único reservatório com o qual ocorre a transmissão de calor. Então:

$$\dot{W}_x = 0 \quad (4.75)$$

$$\sum_r \dot{Q}_r \left(\frac{T_r - T_o}{T_r} \right) = \dot{Q}_r \left(\frac{T_r - T_o}{T_r} \right) \quad (4.76)$$

A fim de particularizar as expressões para o caso de um motor com uma válvula de admissão e uma de escape e considerando ainda que o programa não trabalha com equações diferenciais, são feitas, para intervalos de tempo pequenos - que correspondem a um passo - as seguintes aproximações:

$$dEx = (Ex)_{\text{final}} - (Ex)_{\text{inicial}} = \Delta Ex_{vc} \quad (4.77)$$

$$dS_{vc} = S_{\text{final}} - S_{\text{inicial}} = \Delta S_{vc} \quad (4.78)$$

$$dV_{vc} = V_{\text{final}} - V_{\text{inicial}} = \Delta V_{vc} \quad (4.79)$$

Além disso, cada elemento de massa que cruza a fronteira nesse intervalo de tempo possui ex_f constante. A irreversibilidade de um passo de cálculo pode então ser escrita como

$$I = \delta Q_r \left(\frac{T_r - T_o}{T_r} \right) + \Delta m_{ae} ex_{f_{ae}} + \Delta m_{ee} ex_{f_{ee}} - \Delta m_{as} ex_{f_{as}} \\ - \Delta m_{es} ex_{f_{es}} - (P - P_o)(V_f - V_i) - Ex_f + Ex_i \quad (4.80)$$

onde os índices ae, ee, as, es se referem à válvula de admissão, com massa entrando no cilindro, válvula de escape com massa entrando no cilindro, válvula de admissão com massa saindo do cilindro e válvula de escape com massa saindo do cilindro. Evidentemente, para uma mesma válvula, apenas um dos termos existe para um dado intervalo de tempo. De forma análoga, a expressão (4.74) pode ser reduzida a:

$$I = T_o \left[\Delta m_{as} s_{as} + \Delta m_{es} s_{es} - \Delta m_{ae} s_{ae} - \Delta m_{ee} s_{ee} + S_f - S_i - \frac{\delta Q_r}{T_r} \right] \quad (4.81)$$

Com as equações (4.80) ou (4.81) é possível avaliar passo a passo a irreversibilidade que está sendo produzida. A irreversibilidade para um processo todo pode ser obtida como a somatória dos valores obtidos passo a passo.

O balanço de exergia para um volume de controle em regime permanente pode ser obtido a partir da equação (4.70), considerando-se que as derivadas temporais de quaisquer propriedades são nulas:

$$\dot{I} = \sum_r \dot{Q}_r \left(\frac{T_r - T_o}{T_r} \right) + \sum_e (\dot{m} \text{ exf}) - \sum_s (\dot{m} \text{ exf}) - \dot{W}_x \quad (4.82)$$

Da mesma forma, a partir do Teorema de Gouy-Stodola:

$$\dot{I} = T_o \left[\sum_s (\dot{m} s) - \sum_e (\dot{m} s) - \sum_r \frac{\dot{Q}_r}{T_r} \right] \quad (4.83)$$

Para analisar o motor como um volume de controle em regime permanente, as fronteiras do volume de controle passam a ser não mais a interface entre os gases e a superfície interna das paredes mas sim a superfície externa do motor. Nesse sentido, cumpre observar que a potência de eixo que aparece no balanço de exergia refere-se às condições efetivas. Da mesma forma, o termo de exergia associada à transmissão de calor não mais se refere ao calor transmitido entre os gases e o cilindro apenas, mas incorpora também uma parcela da potência de atrito. O calor transmitido por convecção e radiação diretamente para a atmosfera, que fecha o balanço de energia, não possui exergia pois o reservatório com o qual ocorre essa troca de calor é o próprio ambiente.

No caso presente, não há exergia associada à transmissão de calor pois a dissipação desse calor ocorre por convecção entre o radiador e o ambiente. Quando se pretender utilizar a exergia do fluxo de água de refrigeração, ou de um resfriador de óleo, a tem

peratura do reservatório T_r será diferente da ambiente. Vale lembrar que na referência [30] é apresentada uma análise exer-gética para um motor tomado como volume de controle e do qual se possuía um balanço de energia completo obtido experimentalmente.

No Capítulo 5 serão apresentados os resultados da análise exer-gética obtidos para o motor que foi analisado. Todavia, além da distribuição das perdas e destruições de exergia no decorrer dos processos, é interessante também se obter, para cada proces-so, grupo de processos ou para o motor como volume de controle, figuras de mérito - ou seja, eficiências exer-géticas. A partir da conceituação de eficiência exer-gética explorada no Capítulo 2, foram definidas as seguintes expressões, para a compressão, a com-bustão, a expansão, o escape, a admissão, a fase fechada comple-ta, a fase aberta completa e a global, respectivamente:

$$\epsilon_{CP} = \frac{-\Delta Ex}{|W_{L_{CP}}|} \quad (4.84)$$

$$\epsilon_{CB} = \frac{\Delta Ex + W_{L_{CB}}}{Ex_1} \quad (4.85)$$

$$\epsilon_{EX} = \frac{W_{L_{EX}}}{\Delta Ex} \quad (4.86)$$

$$\epsilon_{ES} = \frac{\Delta Ex}{Ex_1 + |W_{L_{ES}}|} \quad (4.87)$$

$$\epsilon_{AD} = \frac{\Delta Ex}{Ex_0^f + |W_{L_{AD}}|} \quad (4.88)$$

$$\epsilon_{FE} = \frac{W_{L_{FE}}}{\Delta Ex} \quad (4.89)$$

$$\epsilon_{AB} = \frac{Ex_1^f}{Ex_0^f + |W_{L_{AB}}|} \quad (4.90)$$

$$\epsilon_o = \frac{Ne}{Ex_{mis}^f} \quad (4.91)$$

onde ΔEx é a variação de exergia entre os estados inicial e final, os trabalhos líquidos consumidos (necessários) são tomados em valor absoluto, Exf_o é a exergia de escoamento que entraria no cilindro se a admissão fosse perfeita, N_e é a potência de eixo, Exf_{mista} é o fluxo de exergia associado à mistura ar-combustível.

É importante notar que a eficiência exergética de combustão considera o trabalho líquido desenvolvido no processo. A eficiência exergética de admissão é definida de uma forma muito semelhante à definição de rendimento volumétrico. A eficiência exergética da fase aberta considera de forma combinada o escape e a admissão. Ao contrário das definições anteriores, a eficiência global não se refere às condições de dentro do cilindro (indicadas) mas sim às efetivas e portanto considera o efeito do atrito mecânico do motor.

CAPÍTULO 5

OS RESULTADOS DA ANÁLISE PARAMÉTRICA

5.1 - INTRODUÇÃO

Os resultados apresentados a seguir são provenientes de simulações feitas com os modelos anteriormente descritos. Como já mencionado, os modelos termodinâmicos de simulação necessitam de resultados experimentais para que se ajustem os diversos parâmetros e se verifique a adequação dos modelos escolhidos. Uma vez que não foi possível obter conjuntos de dados experimentais para a verificação do ajuste do programa simulador, optou-se por realizar um estudo paramétrico de um motor hipotético, definido pelas condições dadas na Tabela 5.1 e que busca representar um motor de ignição por centelha veicular típico.

As duas versões do motor simulado - a álcool e a gasolina - diferem entre si pela taxa de compressão e pelas características de cada combustível. Evidentemente, a relação ar-combustível estequiométrica de cada caso também é diferente. Todas as demais dimensões geométricas e condições de operação foram mantidas as mesmas, inclusive os parâmetros da função de Wiebe e o sincronismo de válvulas, embora no caso real o sincronismo de válvulas e a velocidade de queima de motores a gasolina e a álcool sejam diferentes.

As pressões nos coletores de admissão e escape foram admitidas constantes, uma vez que não foi modelado o escoamento transitório que ocorre nos coletores. Como as pressões de admissão e de escape são fornecidas como dados, o programa de simulação pode facilmente trabalhar com valores instantâneos medidos ou calculados de pressão.

As condições de operação dadas na Tabela 5.1 correspondem aos valores do caso base. Durante o estudo paramétrico, essas condições foram variadas e seus efeitos discutidos segundo critérios de análise de Primeira e de Segunda Leis da Termodinâmica.

Tabela 5.1 - Condições geométricas e de operação para o motor simulado. Caso base.

Condições Geométricas e de Operação	Alcool	Gasolina
Taxa de compressão	12	8
Relação ar-combustível (base úmida)	8,5	15
Diâmetro do cilindro	80,0	mm
Curso do pistão	79,5	mm
Comprimento da biela	128,0	mm
Rotação de máxima potência	5200	rpm
Pressão atmosférica	1013	mbar
Temperatura ambiente	25°	C
Umidade relativa do ar	60	%
Pressão de admissão	860	mbar
Pressão de escape	1150	mbar
Temperatura das paredes do motor	520	K
Pressão de referência	1013	mbar
Temperatura de referência	288,15	K
Diâmetro: válvula de admissão	30,93	mm
válvula de escape	28,27	mm
Sincronismo de válvulas:		
admissão: abertura	20°	APMS
fechamento	30°	DPMI
escape: abertura	50°	APMI
fechamento	15°	DPMS
Parâmetros para a função de Wiebe:		
início da combustão (TEF)	20°	APMS
duração da combustão (TEB)	60°	
fator de forma (m+1)	3	

5.2 - RESULTADOS TÍPICOS DO MODELO DE SIMULAÇÃO

Embora os dois motores - a álcool e a gasolina - possuam mesmo deslocamento volumétrico (cilindrada), suas taxas de compressão são bastante diferentes. Este fato faz com que os diagramas indicadores dos dois motores sejam bem distintos, com o motor a álcool apresentando uma pressão máxima bastante mais elevada. As Figuras 5.1, 5.2, 5.3 e 5.4 apresentam os diagramas indicadores (pressão versus volume) para os motores a álcool e a gasolina em escalas lineares e logarítmicas, respectivamente. A fase aberta pode ser visualizada com algum detalhe apenas nas Figuras 5.3 e 5.4, onde a escala é logarítmica.

As Figuras 5.5 a 5.9 mostram a pressão instantânea em função do ângulo de manivela para o caso base, nas versões a álcool e a gasolina. Evidentemente, na compressão o motor a álcool atinge pressões mais elevadas devido a sua maior taxa de compressão. Embora os parâmetros empregados na função de Wiebe fossem os mesmos nos dois casos, pode-se notar que, para o motor a gasolina, o pico de pressão ocorre alguns graus de ângulo de manivela depois do pico do motor a álcool. Isto se deve também à menor taxa de compressão do primeiro em relação ao segundo, que faz com que o volume instantâneo para um dado ângulo de manivela seja diferente em cada caso.

Um aspecto interessante do efeito das diferentes taxas de compressão pode ser visto na Figura 5.7, que representa o processo de expansão: ocorre uma inversão nas curvas de pressão, com a diminuição mais rápida da curva para o motor a álcool. Esse fato traz influência também para a fase aberta: a válvula de escape pode ser ajustada para iniciar sua abertura mais tarde no motor a álcool, pois a pressão dentro do cilindro é menor. O caso base definido para as duas versões do motor determina uma mesma geometria e sincronismo no mecanismo de válvulas. Com isso, a curva de pressão durante a exaustão para o caso do motor a álcool é menor, como pode ser visto na Figura 5.8.

Durante o processo de admissão, Figura 5.9, ocorre novamente uma inversão nas curvas de pressão, para um ângulo de aproximadamente 450° . Isto ocorre provavelmente porque, além do volume instantâneo do motor a álcool ser menor (para um dado ângulo de ma-

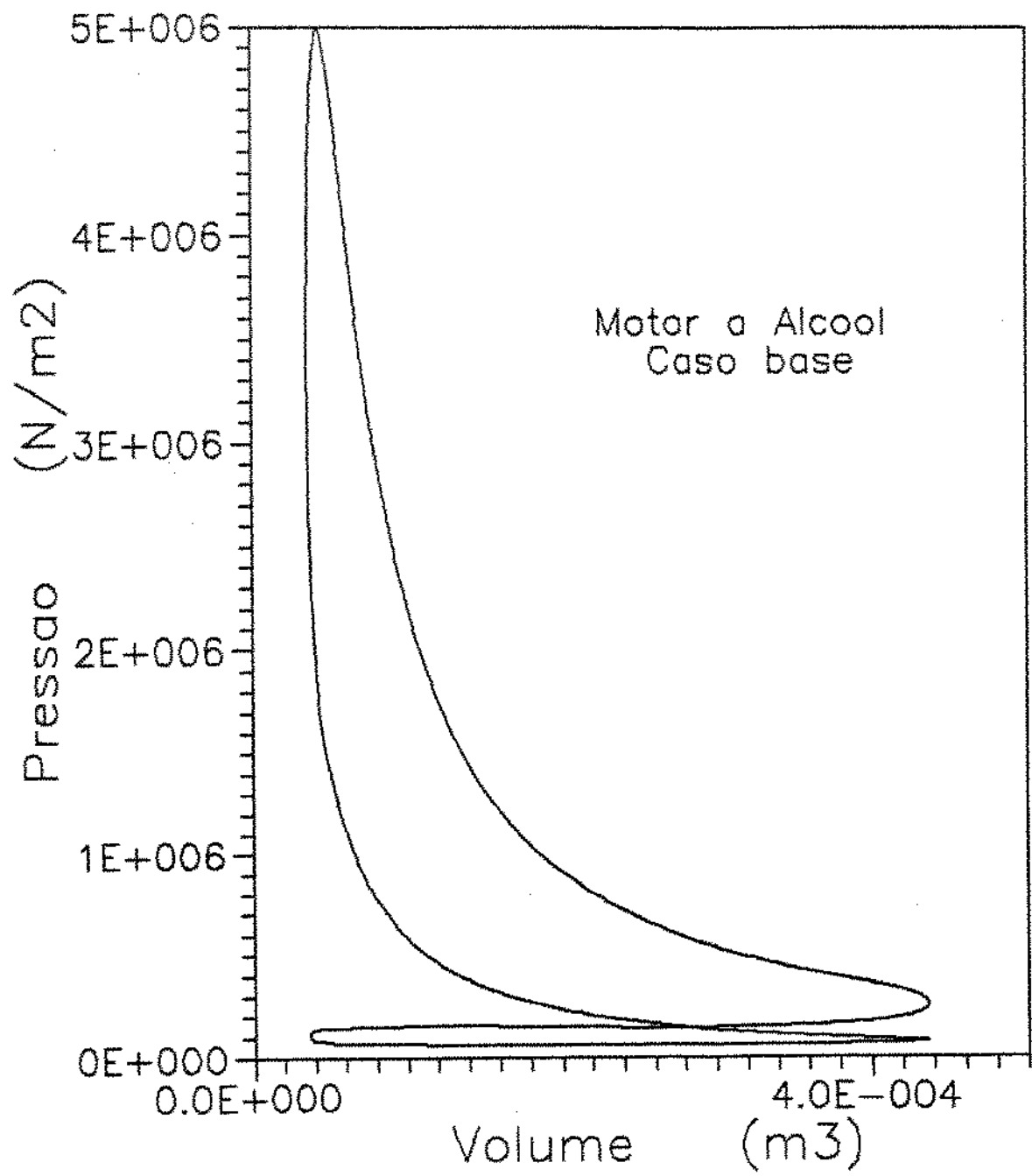


Figura 5.1 - O Diagrama Indicador - versão a álcool.

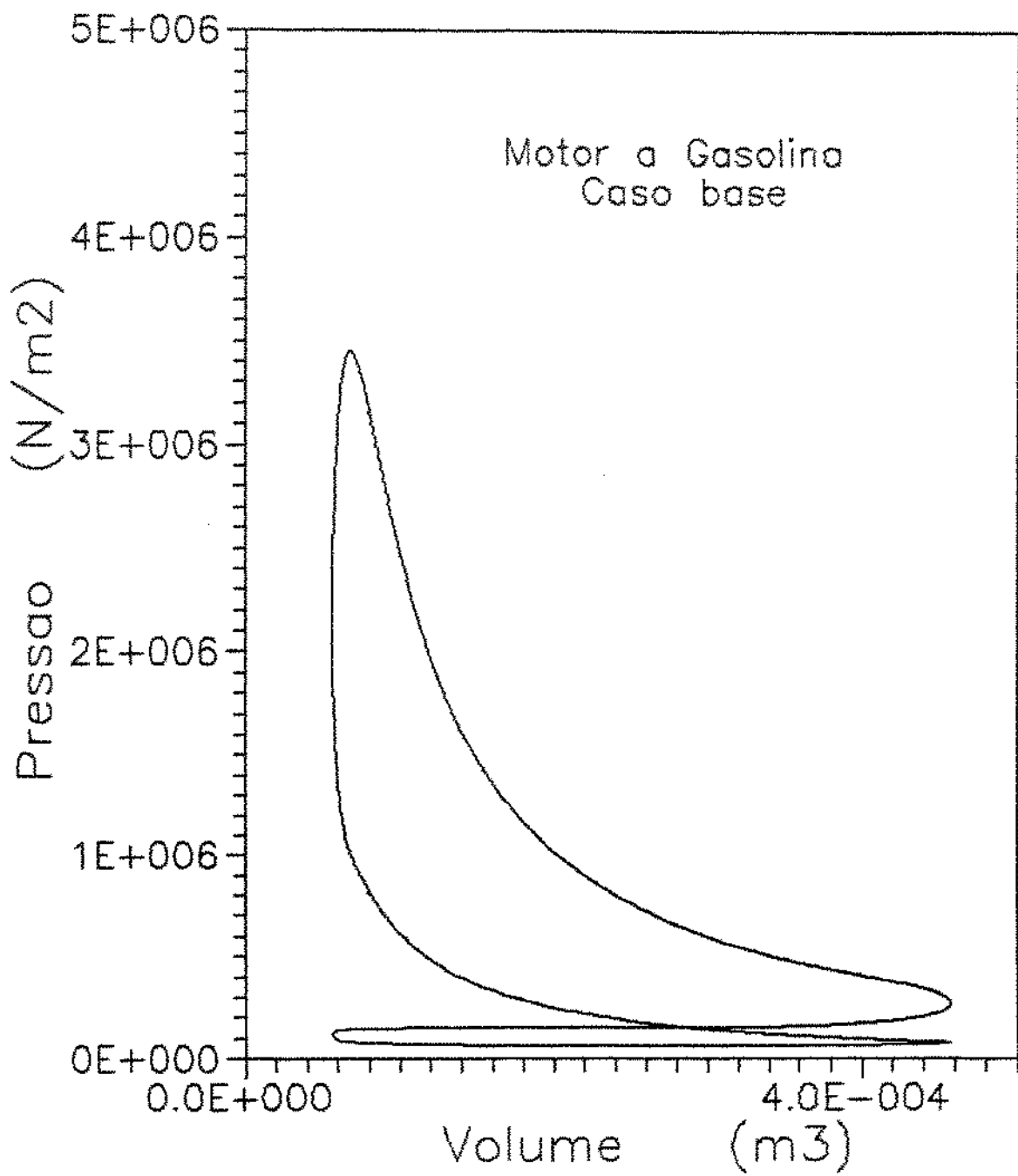


Figura 5.2 - O Diagrama Indicador - versão a gasolina.

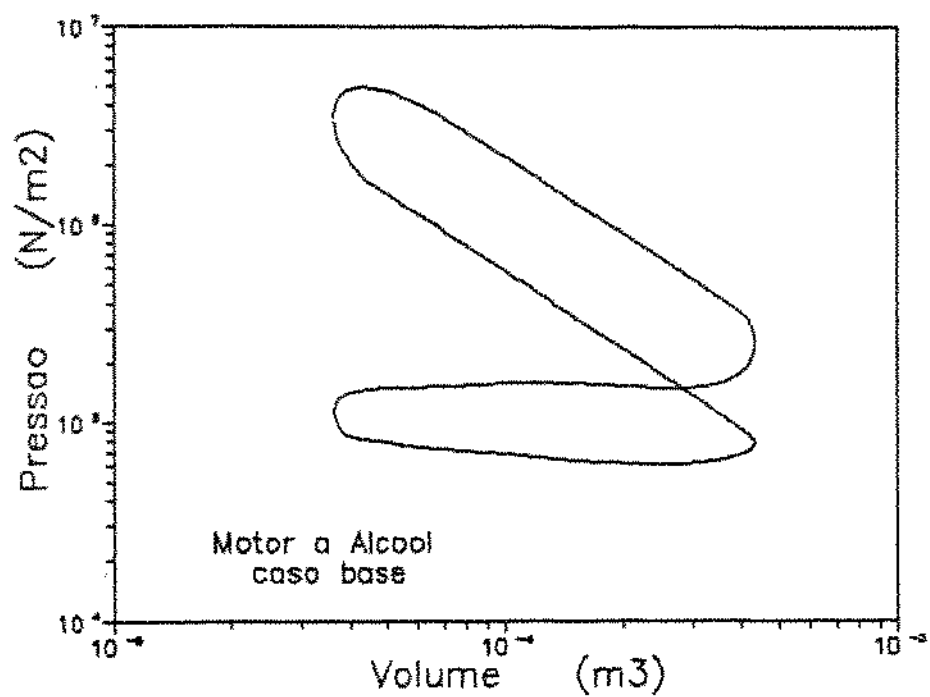


Figura 5.3 - Diagrama $\log(P) \times \log(V)$ - versão a álcool.

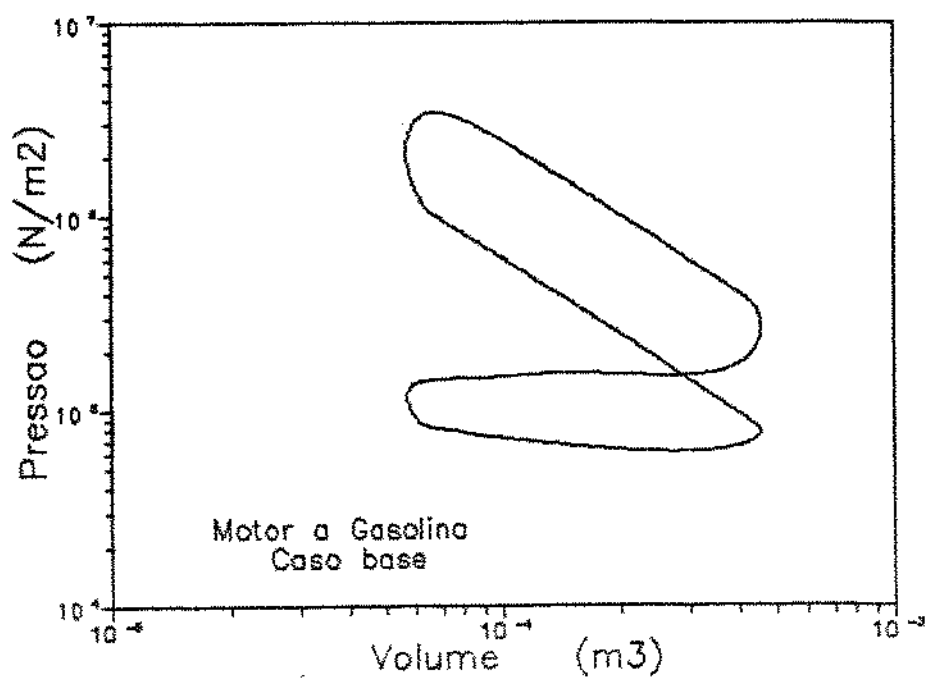


Figura 5.4 - Diagrama $\log(P) \times \log(V)$ - versão gasolina.

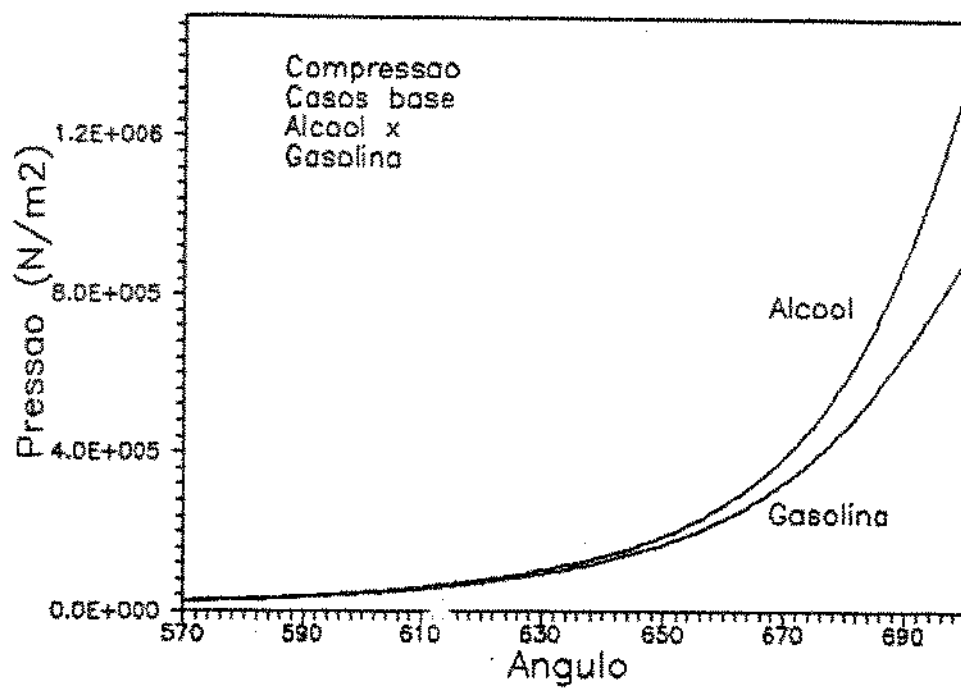


Figura 5.5 - Comparação álcool - gasolina: Compressão.

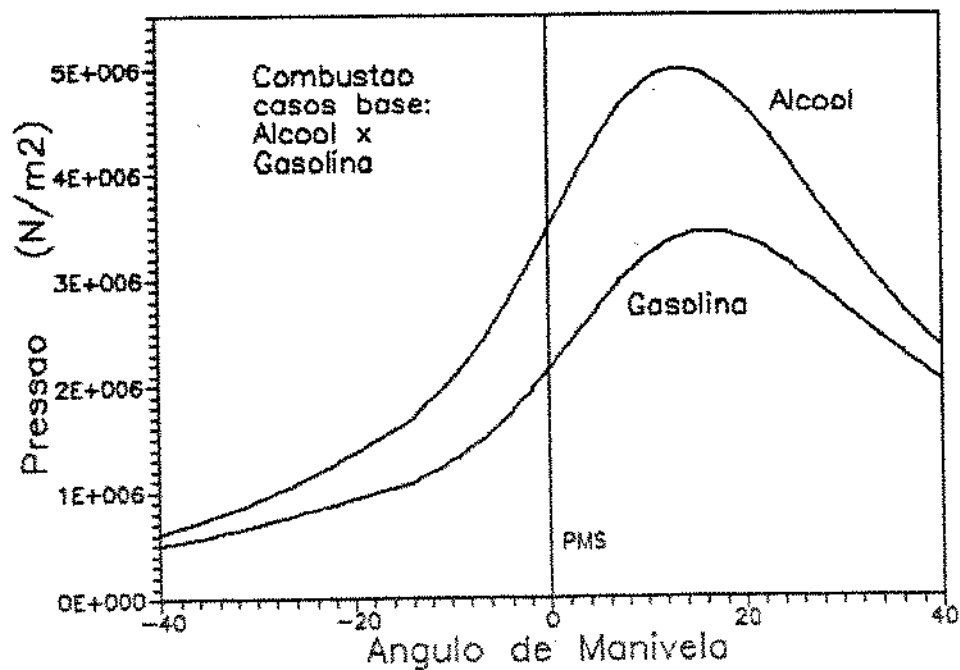


Figura 5.6 - Comparação álcool - gasolina: Combustão.

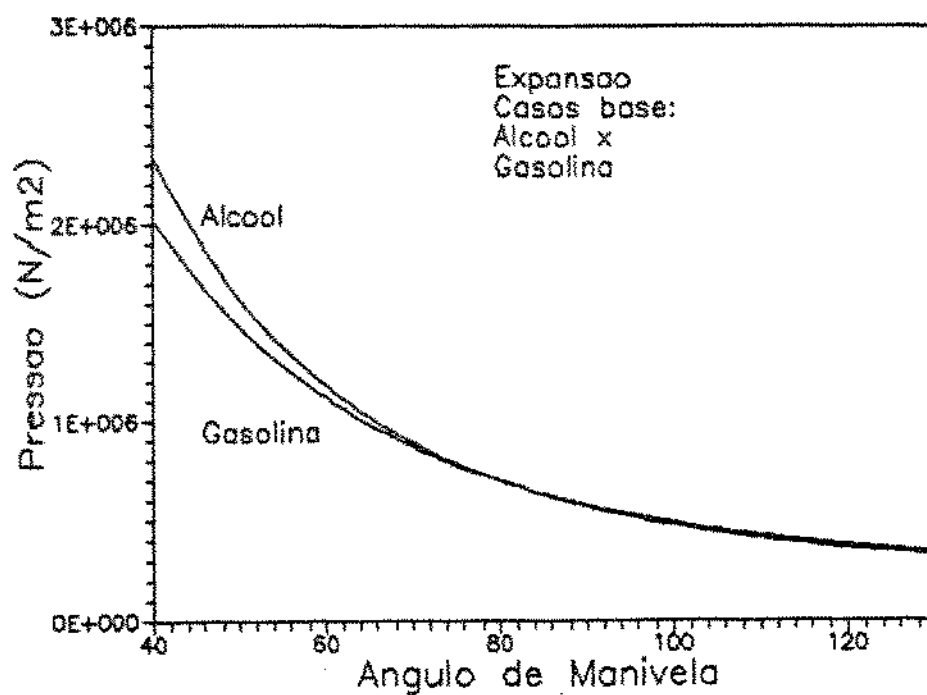


Figura 5.7 - Comparação Alcool - gasolina: Expansão.

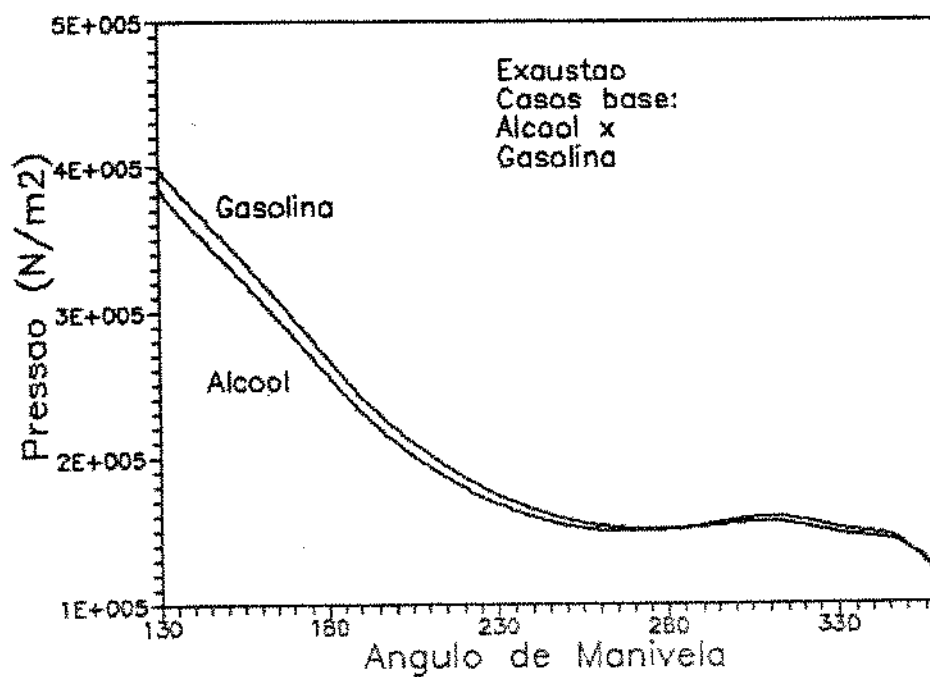
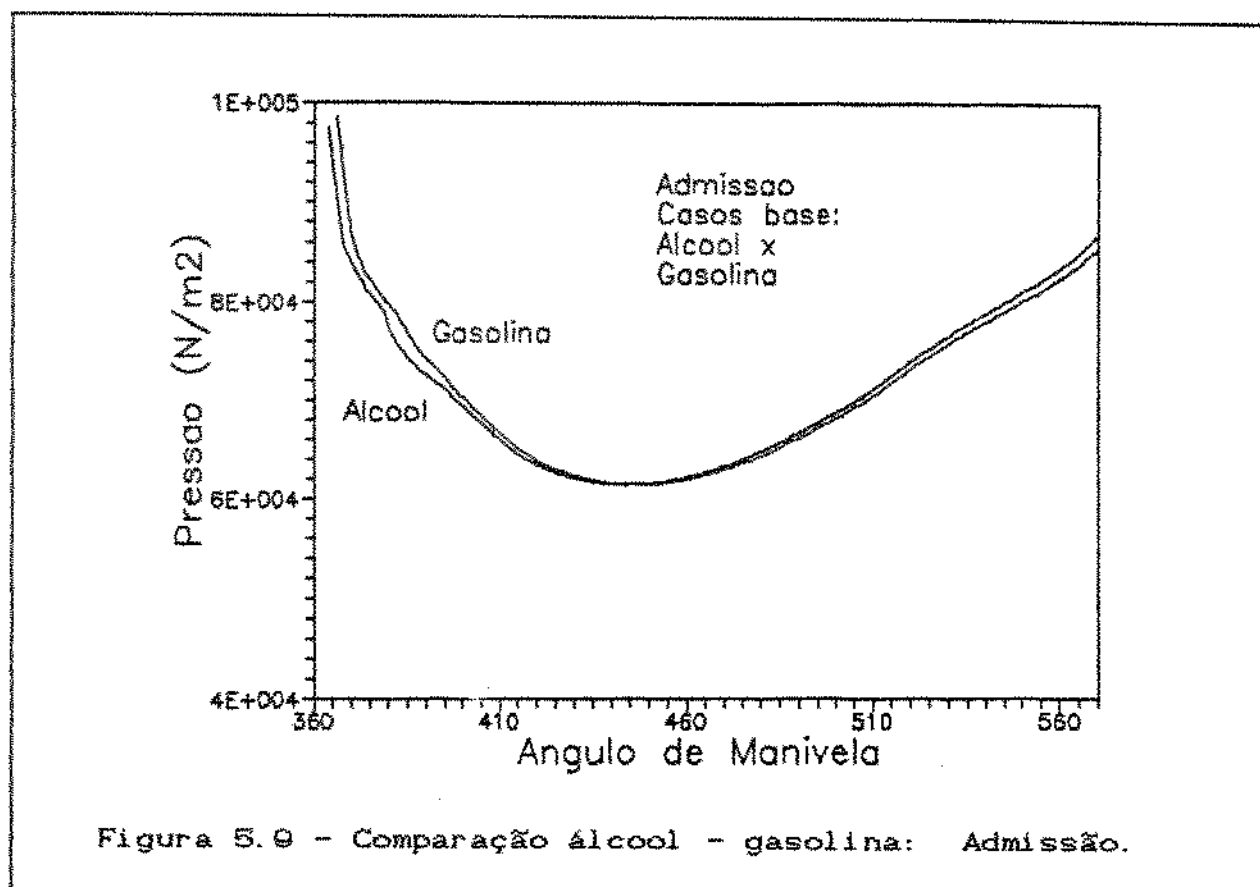


Figura 5.8 - Comparação alcool - gasolina: Escape.



nível), também a temperatura da mistura é maior.

As figuras 5.10 e 5.11 mostram a evolução da temperatura para as duas versões do motor em seu caso-base, ao longo de um ciclo de trabalho completo. Devido a uma maior taxa de compressão, a pressão e temperatura máximas do motor a álcool são maiores; o reflexo disto é que, por quase todo o ciclo de trabalho, a temperatura instantânea da versão a gasolina é menor.

A Figura 5.12 apresenta uma comparação entre a evolução da pressão no caso base e duas outras condições de carga, para a versão a álcool. No caso de carga parcial, foram admitidas as seguintes pressões para os coletores de escape e admissão : 1,05 e 0,60 bar. No caso definido como plena carga, 1,1 e 0,98 bar respectivamente. Todas as demais condições correspondem aos valores da Tabela 5.1. O efeito da menor pressão de admissão - que traduz a redução no rendimento volumétrico ao se reduzir a carga - é amplificado pela taxa de compressão. Além disso, nota-se que ocorre um deslocamento do ângulo de manivela que corresponde à máxima pressão do ciclo de trabalho: ao aumentar a carga, o ponto de máximo de pressão se desloca para a direita.

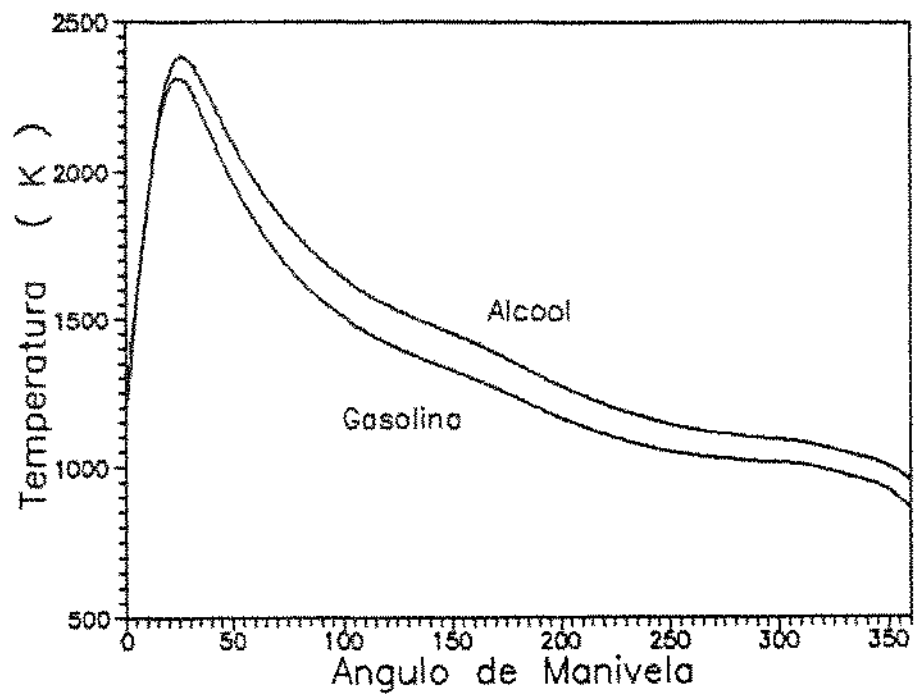


Figura 5.10 - A Temperatura na primeira metade do ciclo.

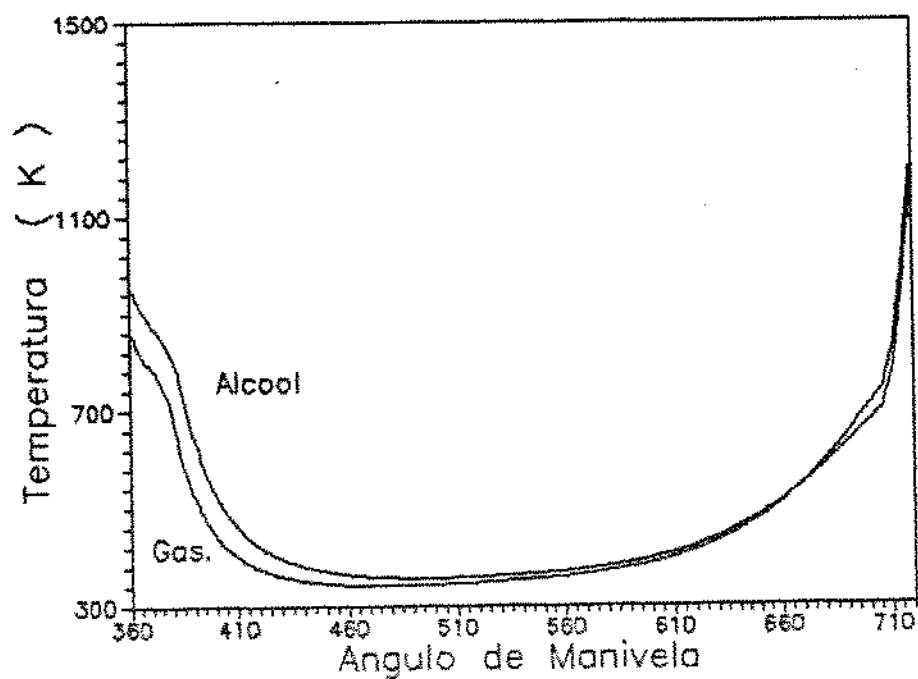
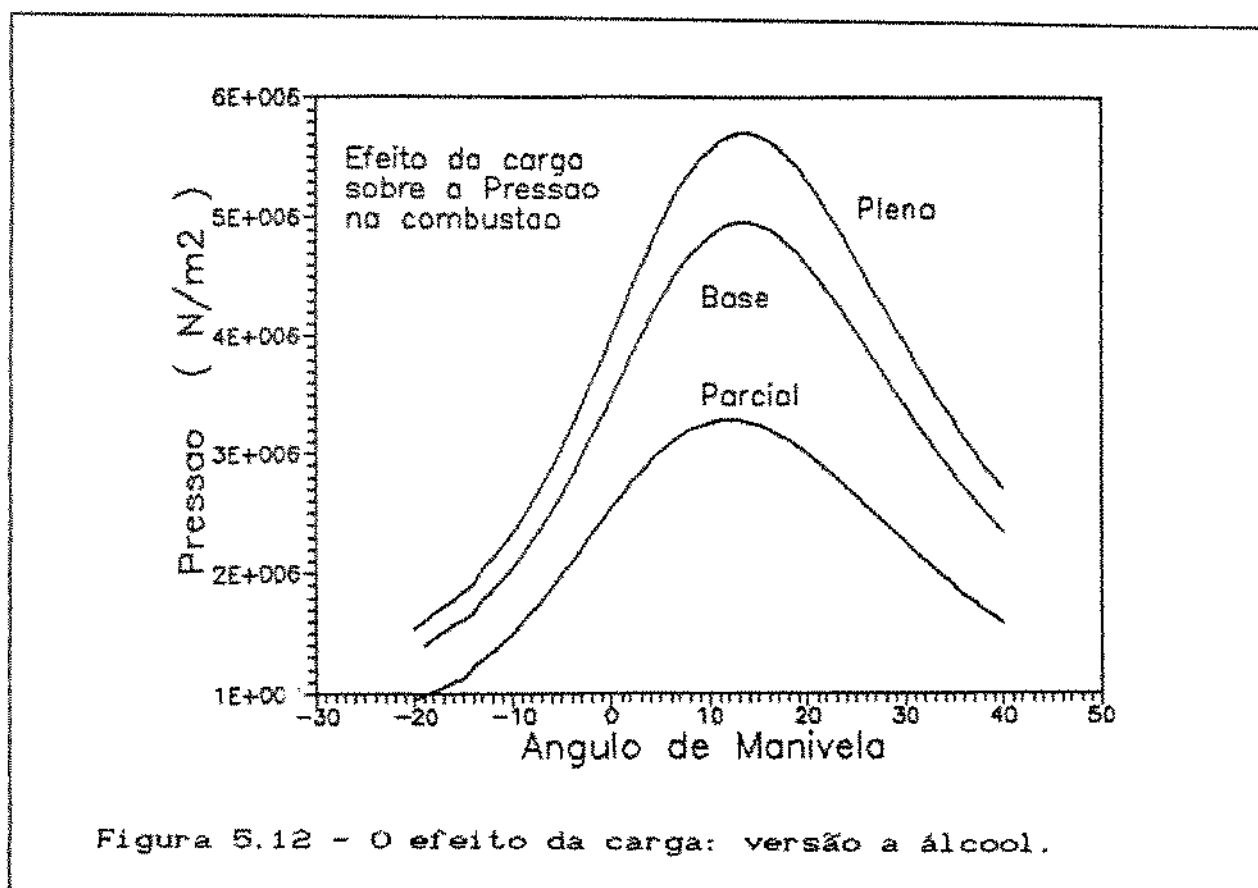


Figura 5.11 - A temperatura na segunda metade do ciclo.



Alguns resultados globais da simulação podem ser vistos nas Figuras 5.13 a 5.15. Em cada figura são mostrados os bem conhecidos conceitos de rendimento térmico indicado (ETAI), rendimento térmico efetivo (ETAE), rendimento mecânico (ETAM) e rendimento volumétrico (ETAV) calculados segundo as equações (4.55), (4.59), (4.66) e (4.58).

O efeito da rotação sobre os parâmetros de eficiência pode ser analisado a partir da Figura 5.13. À medida que aumenta a rotação do motor, o rendimento mecânico decresce devido ao aumento da potência consumida pelo atrito. O rendimento volumétrico é máximo por volta de 3500 rpm e isto ocorre devido às características do mecanismo de válvulas escolhido. Embora se perceba um leve aumento no rendimento térmico indicado - pois quando aumenta a rotação diminui a transmissão de calor instantânea - o rendimento térmico efetivo diminui devido ao menor rendimento mecânico do motor.

O efeito da relação de ar teórico no caso da versão a álcool é encontrado na Figura 5.14. O mesmo é apresentado para o motor a

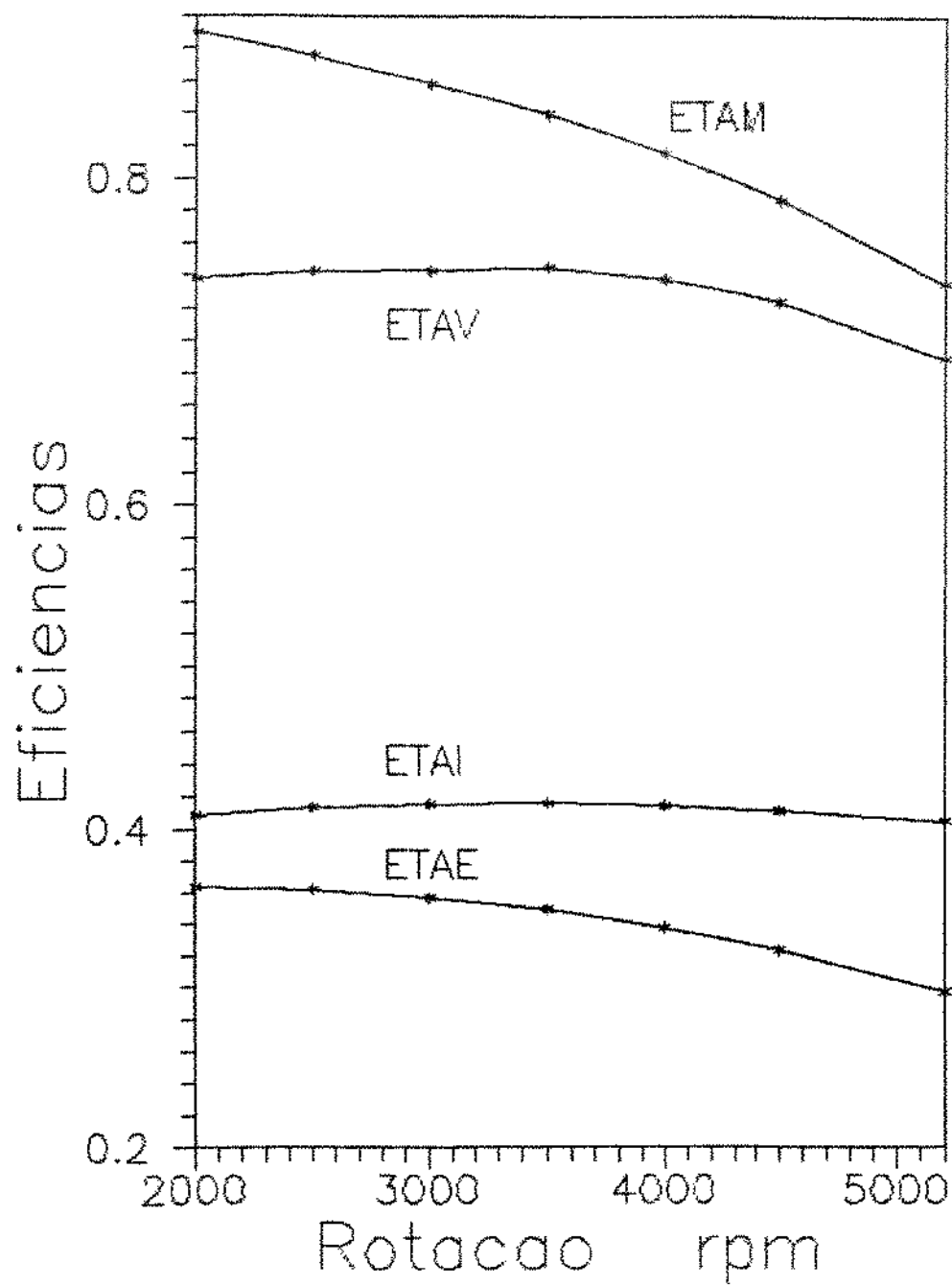


Figura 5.13 - O efeito da rotação sobre os parâmetros de eficiência. Versão a álcool.

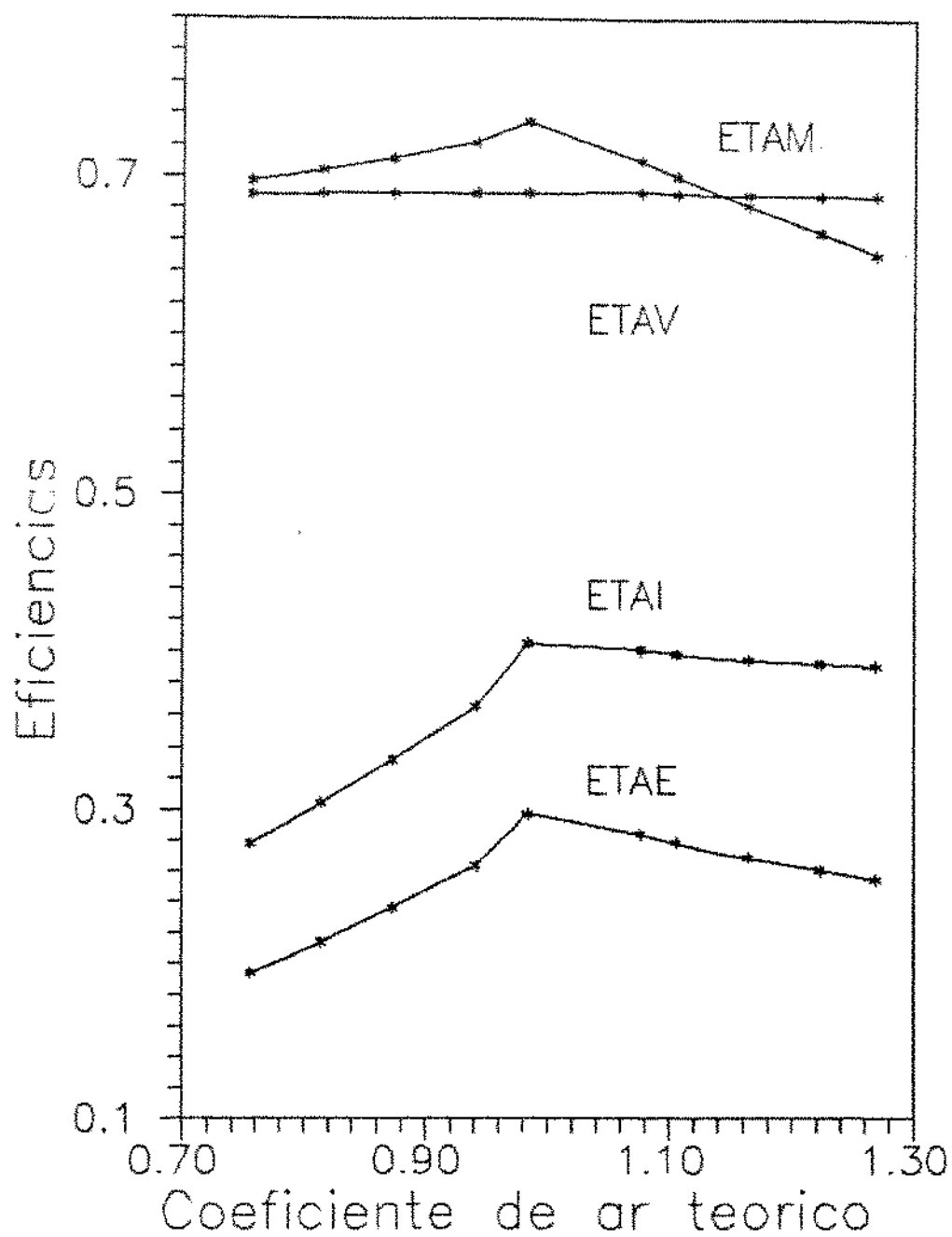


Figura 5.14 - O efeito da relação de ar teórico sobre os parâmetros de eficiência. Versão a álcool.

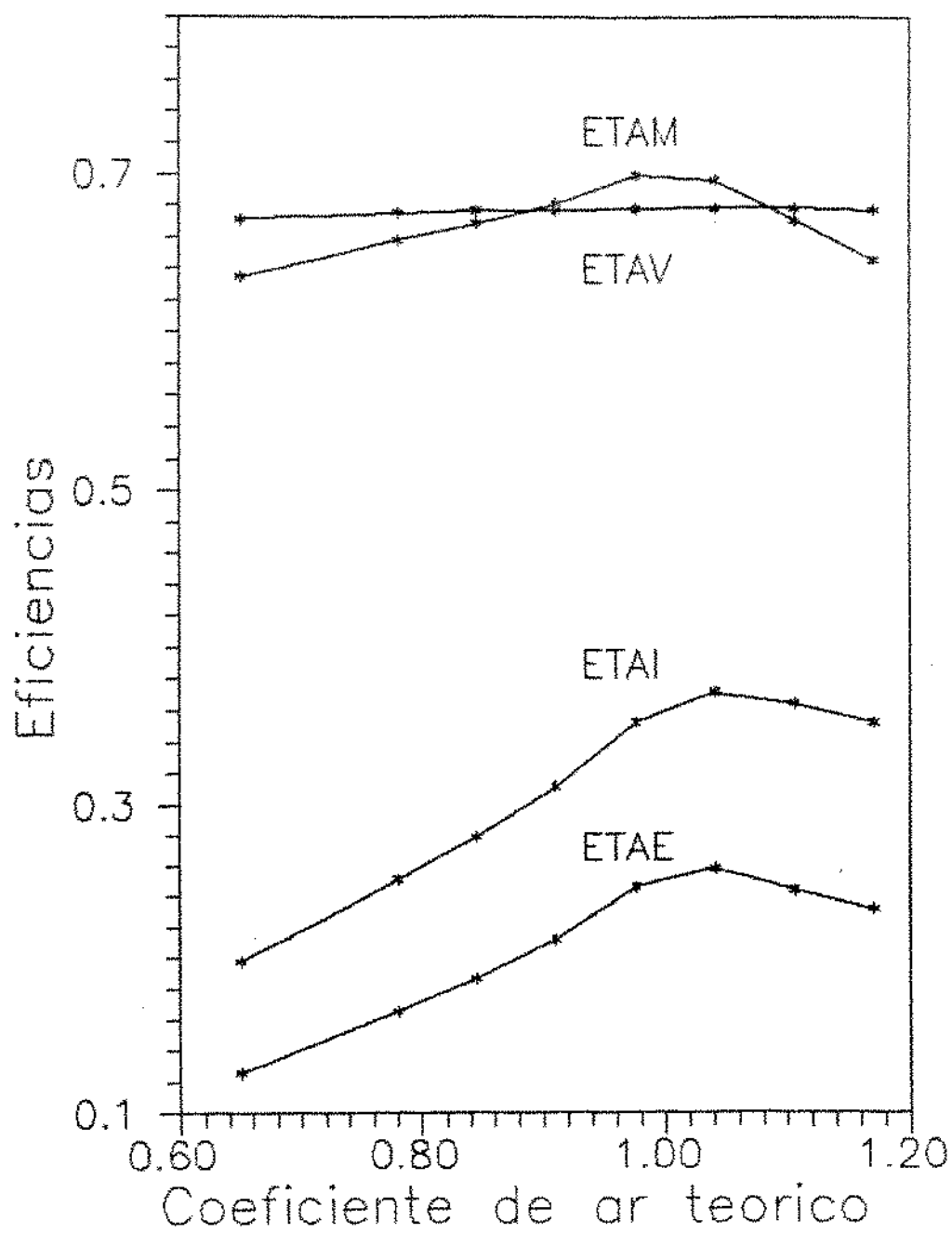


Figura 5.15 - O efeito da relação de ar teórico sobre os parâmetros de eficiência. Versão a gasolina.

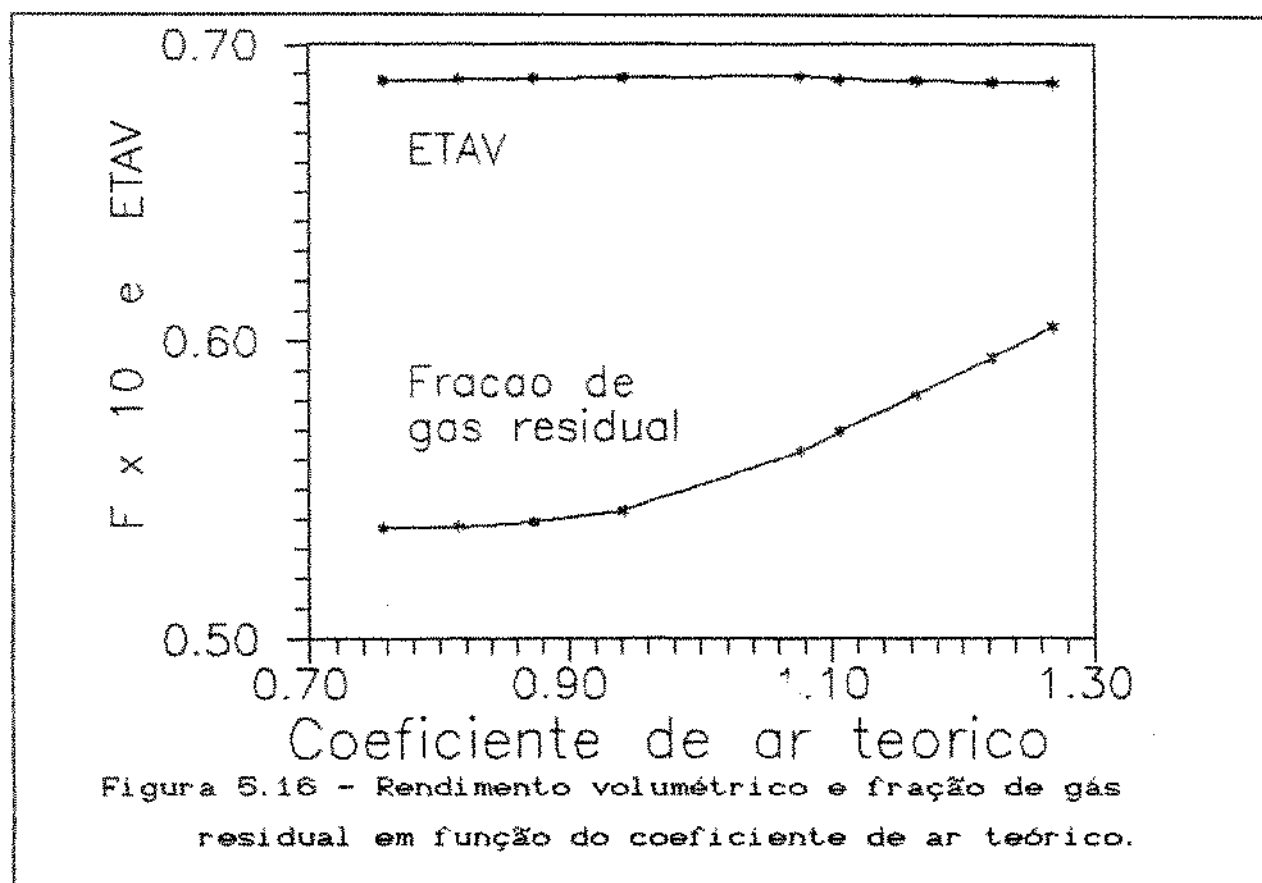
gasolina na Figura 5.15.

O rendimento térmico indicado aumenta com o empobrecimento da mistura, mas passa por um máximo. O comportamento usual de um aumento monotônico no rendimento térmico indicado com o aumento do coeficiente de ar teórico não foi verificado. No caso da versão a álcool, o máximo ocorreu próximo à mistura estequiométrica mas ainda na região de mistura rica; para o motor a gasolina, na região de mistura pobre.

Como as Figuras 5.14 e 5.15 referem-se à variação de um único parâmetro (no caso, o coeficiente de ar teórico), alguns efeitos importantes não estão considerados, como o aumento da duração da combustão. Embora haja um leve aumento no rendimento volumétrico, ao se empobrecer a mistura mantendo a mesma velocidade de queima altera-se bastante as condições de temperatura e pressão dos gases ao se iniciar a fase aberta. O resultado é que as condições no início da compressão, a quantidade de combustível por ciclo e a fração de gás residual são diferentes para cada valor do coeficiente de ar teórico. No caso do motor a álcool, particularmente, ocorre um aumento monotônico considerável da fração de gás residual com o empobrecimento da mistura. Já para a versão a gasolina, a fração de gás residual passa a aumentar apenas quando o coeficiente de ar teórico está por volta de 0,9 e o aumento é menos pronunciado.

A figura 5.16 mostra o rendimento volumétrico e a fração de gás residual em função do coeficiente de ar teórico para a versão a álcool. O fato de aumentar a fração de gás residual e o rendimento volumétrico permanecer aproximadamente constante pode parecer contraditório. Ao se empobrecer progressivamente a mistura, as temperaturas e pressões do ciclo tendem a diminuir. Embora ao final do processo de admissão o motor tenha aspirado aproximadamente a mesma quantidade de mistura - o que garante a constância do rendimento volumétrico - as baixas temperaturas fazem com que a densidade dos gases residuais seja maior.

O rendimento mecânico foi estimado a partir da metodologia prescrita na Norma ABNT NBR 5477. Com a rotação constante, o rendimento mecânico passa a ser uma função exclusiva da pressão média indicada. Assim, quando o coeficiente de ar teórico passa para a região de mistura pobre, o rendimento mecânico cai devido



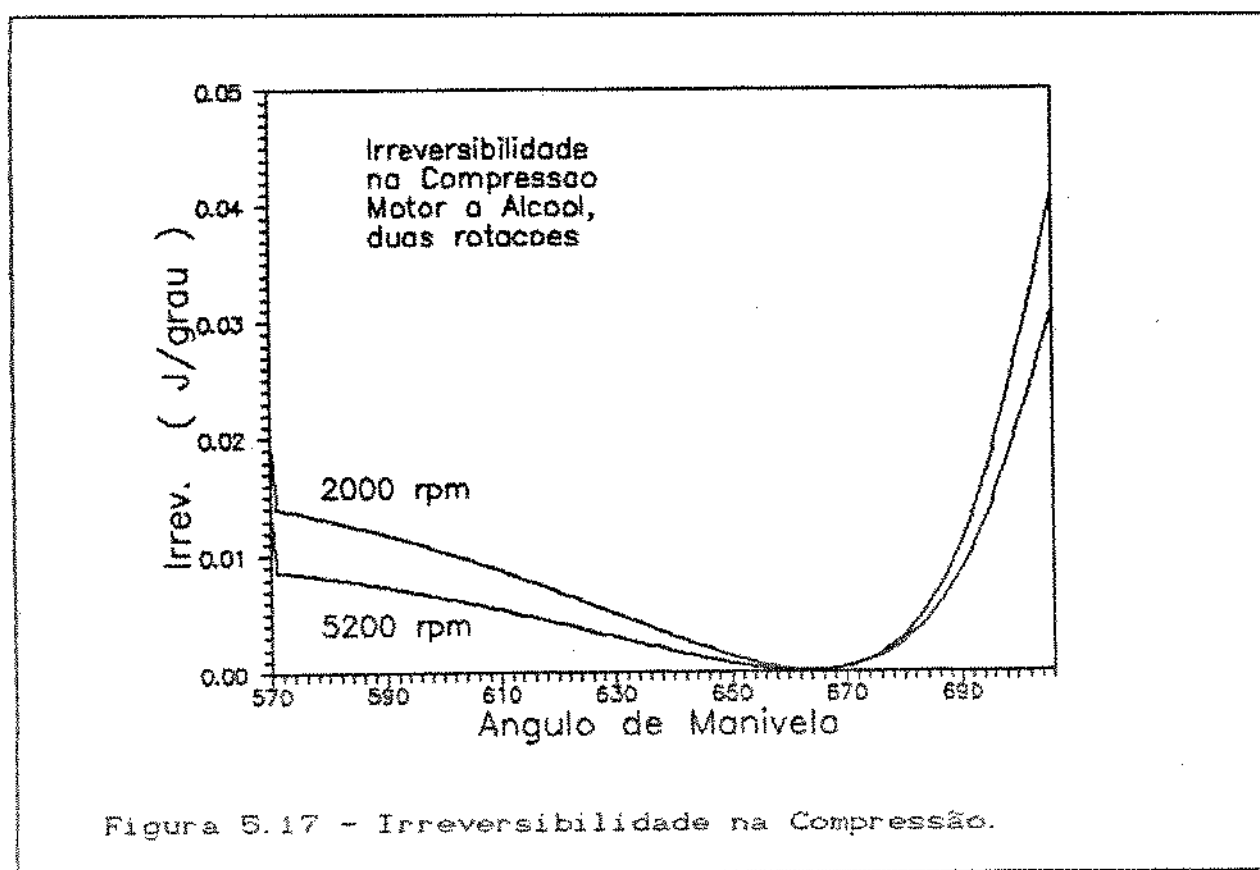
à queda da pressão média indicada. O rendimento térmico efetivo, portanto, amplifica a tendência de queda do rendimento térmico indicado na região de mistura pobre.

5.3 - A IRREVERSIBILIDADE DE CADA PROCESSO

O modelo de simulação foi empregado para analisar cada processo que compõe o ciclo de trabalho de um motor: compressão, combustão, expansão, escape e admissão. Uma vez que a simulação considera como fronteiras a interface entre os gases e as paredes do motor, a análise de irreversibilidades não considera o atrito. A transmissão de calor com diferenças de temperatura finitas e as reações químicas são as origens da irreversibilidade. Embora neste trabalho seja admitido equilíbrio químico entre as espécies acima de 700 K - e portanto ocorram reações de dissociação ou recombinação durante quase todo o ciclo - é na combustão que reside a maior fonte de irreversibilidade.

A irreversibilidade (por grau de ângulo de manivela) para cada processo pode ser vista nas figuras 5.17 a 5.21. Em cada figura, foram colocados os resultados para duas rotações: 5200 rpm e 2000 rpm. Quando a rotação é mais baixa, aumenta a transmissão de calor para a água de refrigeração e isso explica porque a irreversibilidade para 2000 rpm é maior do que para 5200 rpm na fase fechada do ciclo (compressão, combustão e expansão).

A primeira figura desta série mostra a irreversibilidade por grau durante o processo de compressão. Para as duas rotações a irreversibilidade tende a zero. O ângulo onde isto ocorre corresponde ao ângulo no qual a temperatura da mistura ar-combustível e resíduos tende à temperatura das paredes metálicas do motor. Para ângulos de manivela menores, as paredes cedem calor para os gases e para ângulos maiores, o fluxo de calor se inverte. Como a temperatura durante a compressão é menor do que 700 K, toda a irreversibilidade é devida à transmissão de calor entre os gases e as paredes - não existem reações químicas neste processo.



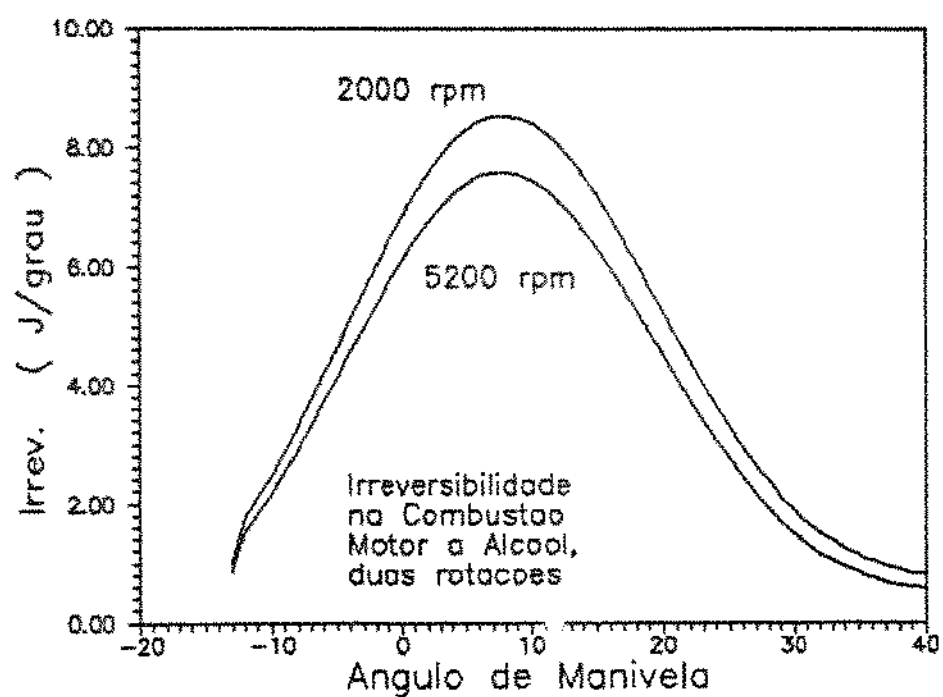


Figura 5.18 - Irreversibilidade na Combustão.

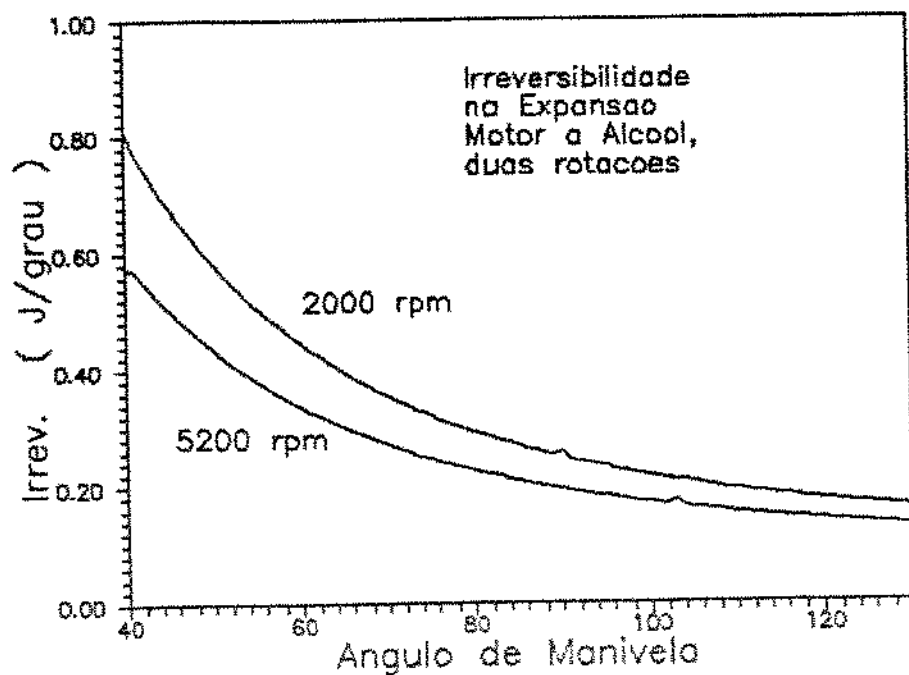


Figura 5.19 - Irreversibilidade na Expansão.

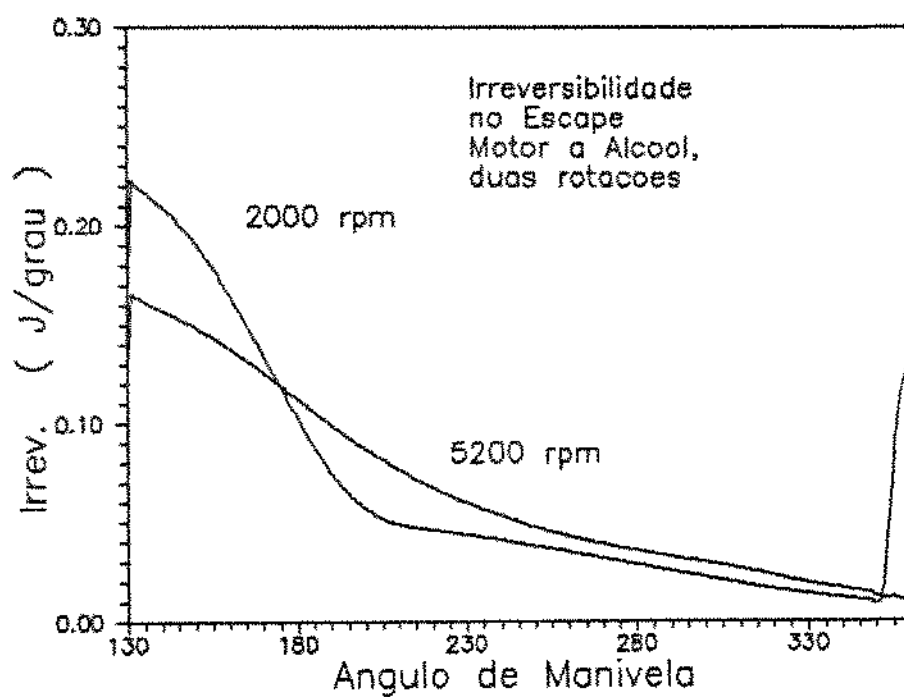


Figura 5.20 - Irreversibilidade no Escape.

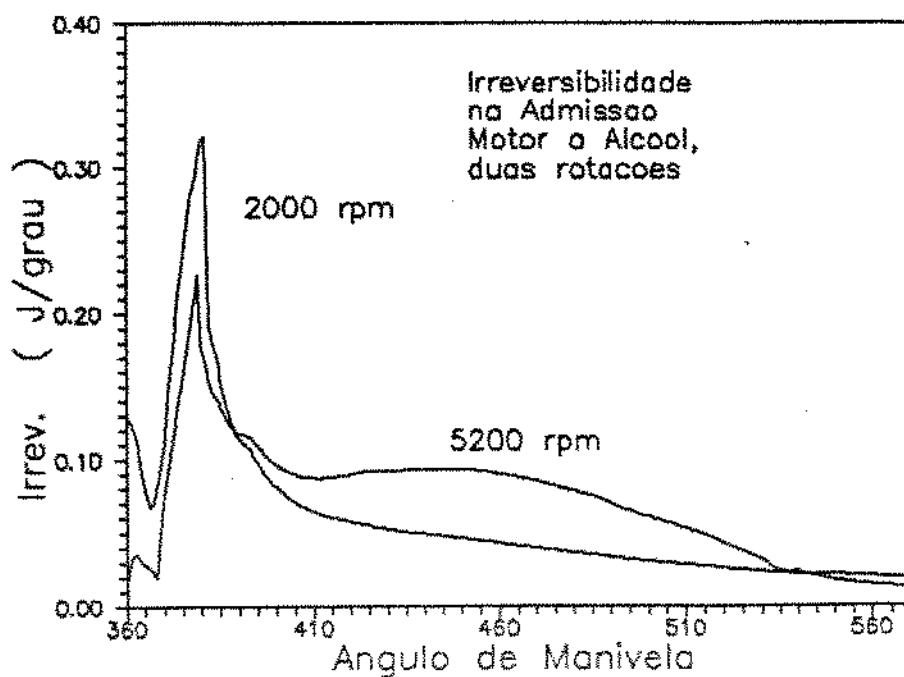


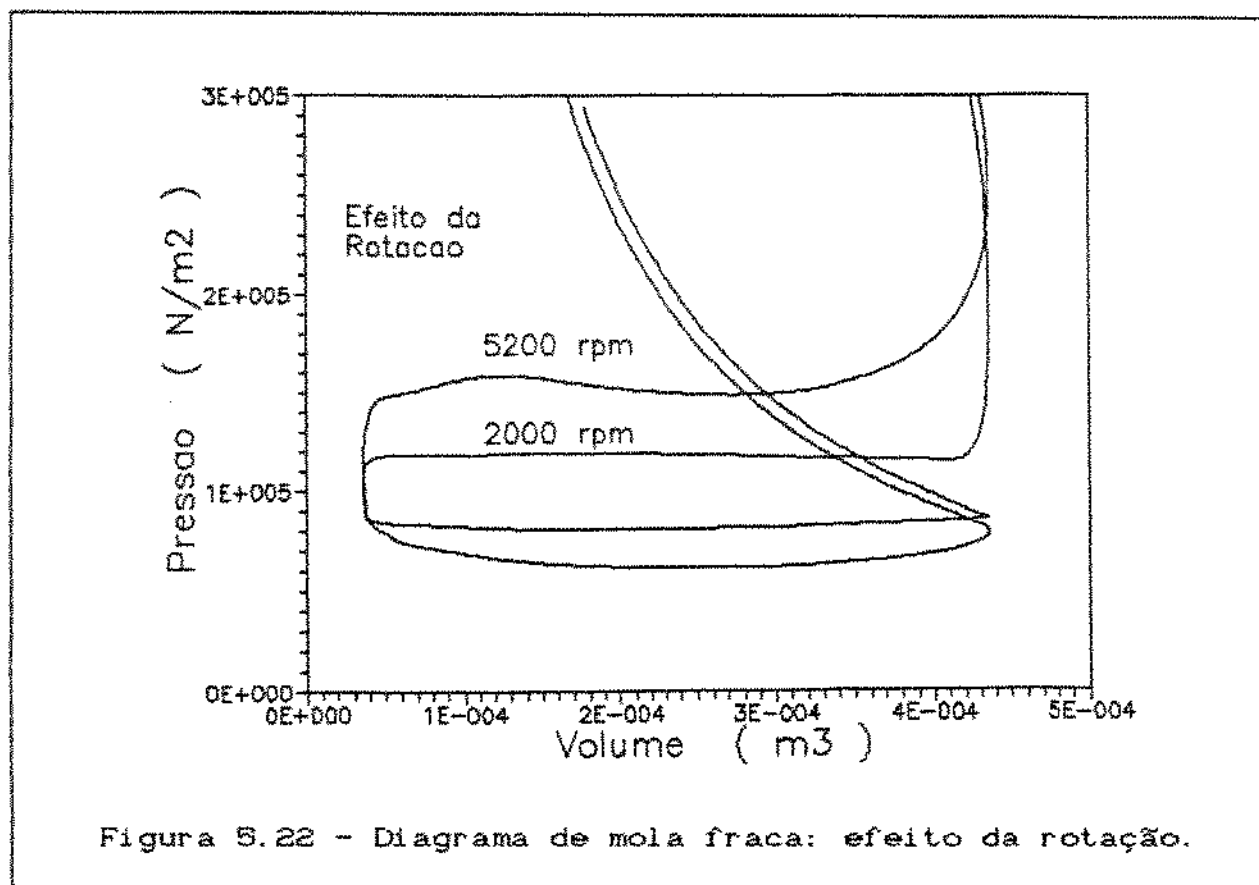
Figura 5.21 - Irreversibilidade na Admissão.

Durante a combustão, a irreversibilidade aumenta violentamente: de uma a duas ordens de grandeza em relação aos demais processos. Embora haja um aumento de temperatura devido à própria combustão que aumenta a irreversibilidade devida à transmissão de calor, é a reação de combustão a principal fonte de irreversibilidade. Isto pode ser comprovado pelo fato de que as curvas de irreversibilidade durante a combustão seguem a taxa de liberação de energia pela combustão ($dX/d\theta$) de forma muito próxima.

No processo de expansão (Figura 5.19) ocorrem reações de recombinação de espécies químicas, devido às altas temperaturas. Todavia, dada a hipótese de equilíbrio químico, essas reações são reversíveis.

Durante o processo de escape (Figura 5.20) a irreversibilidade correspondente ao caso de 2000 rpm passa a ser inferior à de 5200 rpm. Como a exaustão espontânea (*blow-down*) é muito mais rápida para 2000 rpm, a exaustão forçada pelo movimento do pistão (após 180°) encontra menos massa de gases para expulsar do que a 5200 rpm. A Figura 5.22 apresenta o diagrama de mola fraca para os dois casos em foco, onde pode ser constatado que a 5200 rpm uma grande quantidade de massa ainda está presente no cilindro, aumentando o trabalho de expulsão dos gases residuais. Para a rotação baixa surge um pico no final da exaustão, que se prolonga durante a admissão, causado pelo rápido escoamento reverso durante o período de cruzamento de válvulas. Esse mesmo fenômeno ocorre para 5200 rpm, mas com menor intensidade e com uma defasagem de alguns graus, como pode ser visto no início da Figura 5.21.

Verificando o processo de admissão (Figura 5.21) nota-se um pico pronunciado para os dois casos representados. Esses picos estão relacionados com a re-aspiração dos gases queimados que haviam retornado para o coletor de admissão durante o escoamento reverso. Como a massa de gases residuais que retorna do coletor de admissão é maior para a rotação menor, o pico correspondente é mais pronunciado. No caso da rotação mais elevada, a maior velocidade do pistão produz um vácuo maior no cilindro - o que também pode ser constatado pela Figura 5.22 - e portanto a irreversibilidade associada é mais elevada durante a maior parte da admissão. Para 2000 rpm existe novamente um escoamento reverso no fi-



nal da admissão, fazendo com que novamente a irreversibilidade seja maior do que para 5200 rpm.

Uma forma bastante conveniente de analisar cada processo que compõe o ciclo completo consiste em empregar os conceitos de eficiências exergeticas. Na Tabela 5.2 são mostradas as eficiências para cada processo, a partir das definições introduzidas no Capítulo 4, para diferentes rotações do motor a álcool.

A eficiência exergetica da compressão (ϵ_{cp}) é bastante alta, o que indica que este processo produz pouca irreversibilidade e isto se deve à pequena transmissão de calor constatada. Embora a transmissão de calor global aumente quando a rotação diminui, a parcela devida ao processo de compressão passa por um mínimo - quando a eficiência exergetica atinge um máximo.

A eficiência exergetica do processo de combustão (ϵ_{cb}) aumenta à medida que a rotação diminui. Os valores de exergia iniciais e finais do processo não são os mesmos quando a rotação muda e portanto este resultado não é previsível *a priori*.

Já o comportamento da eficiência exergetica do processo de expansão (ϵ_{ex}) depende apenas da transmissão de calor. Como esta

Tabela 5.2 - A eficiência exergética de cada processo para rotações variáveis. Versão a álcool.

rpm	5200	4500	4000	3500	3000	2500	2000
ϵ_{CP}	0,988	0,989	0,989	0,989	0,988	0,988	0,986
ϵ_{CB}	0,725	0,725	0,725	0,726	0,727	0,729	0,731
ϵ_{EX}	0,829	0,826	0,822	0,818	0,811	0,804	0,793
ϵ_{FE}	0,559	0,555	0,551	0,546	0,539	0,530	0,518
ϵ_{ES}	0,942	0,963	0,975	0,973	0,967	0,962	0,958
ϵ_{AD}	0,623	0,656	0,669	0,676	0,676	0,676	0,672
ϵ_{AB}	0,627	0,661	0,676	0,684	0,683	0,682	0,681
ϵ_G	0,281	0,306	0,319	0,328	0,334	0,339	0,339

aumenta quando a rotação diminui, a eficiência também diminui.

A eficiência da fase fechada (ϵ_{FE}) considera de forma global os processos de compressão, combustão e expansão. Como ela decresce com a rotação de forma monotônica, é possível afirmar que a transmissão de calor aumentada é a responsável por isto.

Para o processo de escape, a eficiência (ϵ_{ES}) passa por um máximo; neste caso dois efeitos se contrapõem: por um lado, melhora o escape espontâneo (blow-down), como será visto adiante e por outro lado aumenta o escoamento reverso do coletor de escape para o cilindro nos momentos finais do processo.

A eficiência exergética do processo de admissão (ϵ_{AD}) também passa por um máximo com a queda de rotação, acompanhando a curva do rendimento volumétrico mostrada na Figura 5.13 devido sua definição ser análoga.

A eficiência exergética da fase aberta (ϵ_{AB}) considera de forma global os processos de escape e admissão. Como as eficiências dos dois processos passam por um máximo em torno de 3500 rpm, o mesmo ocorre com a eficiência exergética da fase aberta.

A eficiência exergética global (ϵ_G) relaciona a potência produzida com o fluxo de exergia de escoamento da mistura que

entra no motor. Considerando o atrito e as irreversibilidades associadas à transmissão de calor e à reação de combustão, a eficiência exergetica global aumenta ao cair a rotação principalmente porque o atrito é fortemente dependente da rotação. O mesmo comportamento já havia sido observado para o rendimento térmico efetivo, tal como mostrado na Figura 5.13.

A fim de analisar o efeito global da variação de rotação, a Tabela 5.3 apresenta o balanço global exergetico em termos de percentuais da exergia de escoamento trazida pela mistura para dentro do cilindro. Para cada caso analisado são apresentadas a exergia que entra no motor Ex_E através da mistura ar-combustível, o trabalho líquido do ciclo W_L , a exergia associada à transmissão de calor para um reservatório à temperatura das paredes do motor Ex_a (em geral esta exergia é dissipada posteriormente pelo sistema de arrefecimento do motor), a exergia que deixa o motor nos gases de escape Ex_s (também normalmente dissipada na atmosfera) e a destruição de exergia $Dest.$ (ou seja, a irreversibilidade) que fecha o balanço.

O trabalho líquido percentual passa por um máximo por volta de 3500 rpm, assim como seu equivalente na análise energética usual - o rendimento térmico indicado (Figura 5.13).

Tabela 5.3 - O balanço exergetico percentual para rotações variáveis. Versão a álcool.

rpm	Ex_E	W_L	Ex_a	Ex_s	Dest.
5200	1.	0,3827	0,0876	0,2447	0,2849
4500	1.	0,3889	0,0885	0,2382	0,2844
4000	1.	0,3910	0,0897	0,2328	0,2865
3500	1.	0,3912	0,0915	0,2270	0,2903
3000	1.	0,3894	0,0944	0,2209	0,2953
2500	1.	0,3866	0,0982	0,2146	0,3006
2000	1.	0,3812	0,1038	0,2071	0,3060

Com a redução de rotação aumenta o fluxo de calor e portanto a exergia associada a esse fluxo. Deve ser notado que a exergia do calor transmitido para as paredes do motor está entre 40 e 50% do calor, e isto significa que apenas uma parcela do calor rejeitado é passível de ser aproveitada.

A exergia que sai com os gases de escape, por sua vez, diminui com a redução da rotação, comportamento esse contrário ao termo de destruição de exergia (ou seja, a irreversibilidade).

5.4 - ANÁLISE EXERGÉTICA DA COMBUSTÃO

A metodologia empregada para modelar a combustão, descrita no Capítulo 4, estratifica os gases em duas regiões durante a combustão: região de mistura não queimada e região de gases queimados. Assim, cada região possui uma certa quantidade de massa e uma certa temperatura, embora a pressão não varie através da câmara. Na figura 5.23 são mostradas as temperaturas de cada região

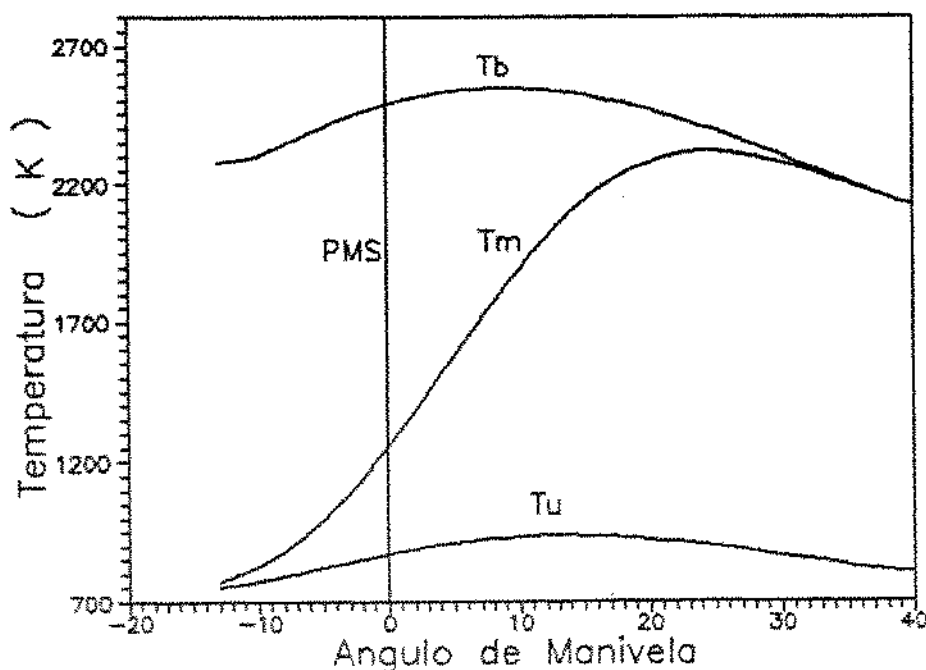


Figura 5.23 - As temperaturas durante a combustão.

e a temperatura média termodinâmica para o caso base da versão a álcool. Deve ser observado que os valores máximos de cada uma das temperaturas ocorre em momentos diferentes (do ângulo de manivela): a temperatura média (T_m) máxima ocorre já próximo ao fim da combustão, a temperatura máxima da região já queimada (T_b) é simultânea com a pressão máxima do ciclo e a temperatura máxima da mistura não queimada (T_u) é intermediária. Não existe a região de mistura não queimada após 40° - que neste caso é o ângulo para o qual cessa a combustão - e portanto a partir de desse ângulo T_b e T_m coincidem. Da mesma forma, antes de -13° (ou 707° - quando começa a combustão) T_u e T_m são a mesma temperatura.

Uma vez que a combustão é o processo que mais destrói energia, foi realizado um estudo de sensibilidade da irreversibilidade com os parâmetros da função de Wiebe. Antes de analisar a combustão pela Segunda Lei, porém, serão apresentados os efeitos dos parâmetros da função de Wiebe sobre a evolução da pressão.

Na figura 5.24 é apresentado o efeito do ponto de ignição sobre a evolução da combustão para o motor a álcool. Os demais

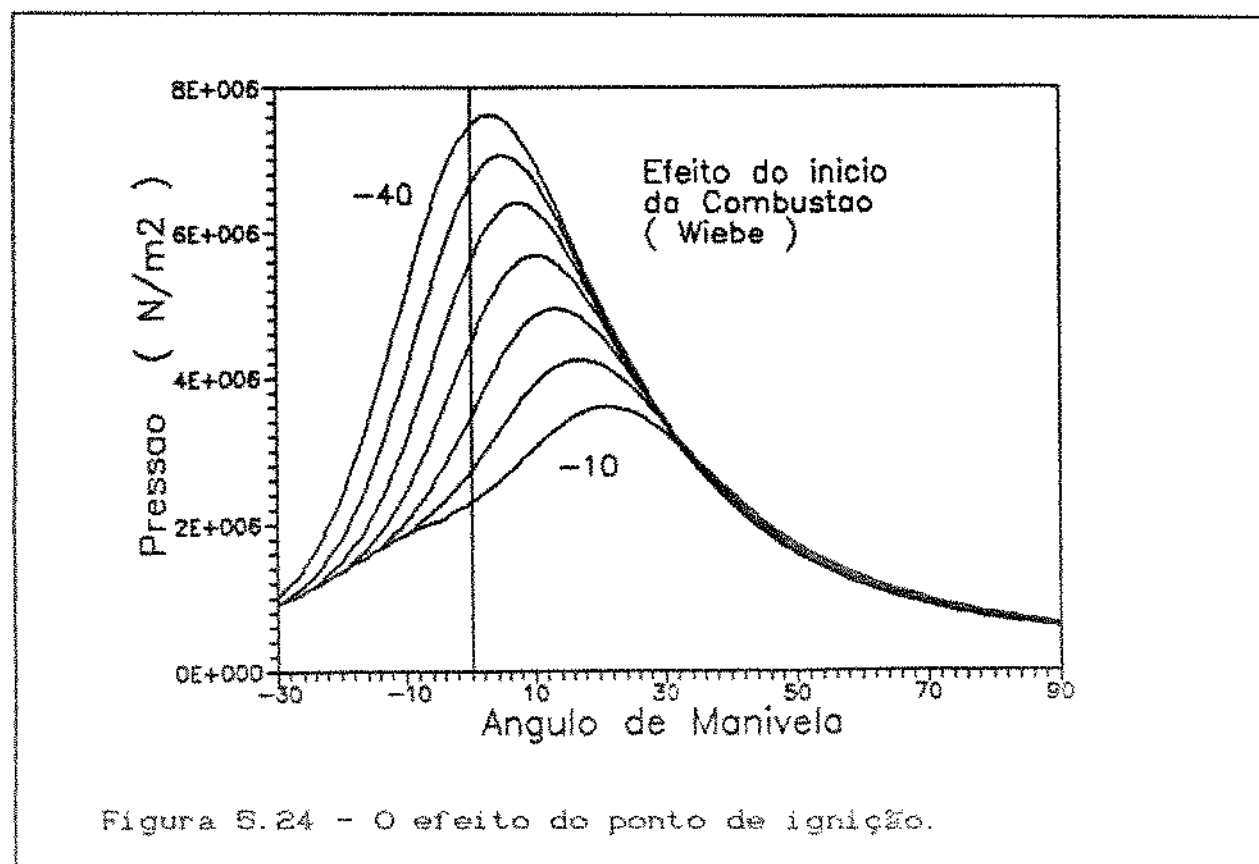


Figura 5.24 - O efeito do ponto de ignição.

parâmetros da combustão foram mantidos constantes - o que só é possível em uma simulação. As bem conhecidas características do efeito do ponto de ignição aparecem com clareza: ao se adiantar o início da combustão ocorre um aumento da pressão máxima do ciclo e o deslocamento do ponto de máximo para valores menores do ângulo de manivela. Um avanço excessivo, porém, causa um aumento do trabalho de compressão que não pode mais ser compensado pelo aumento do trabalho de expansão. Embora o parâmetro de duração (TEB) não tenha variado, ocorre uma inversão entre as curvas de pressão para ângulos acima de 20° . Uma vez que o programa pressupõe combustão normal, não é possível avaliar em que condições o motor sofre o distúrbio da detonação, mesmo quando se adianta bastante o ponto de ignição e se atinge uma pressão máxima muito elevada.

O efeito do parâmetro de duração da combustão, também para a versão a álcool, está exposto na figura 5.25. Ao se reduzir a duração da combustão, o efeito é muito semelhante ao de adiantar o início da combustão: ocorre um aumento da pressão máxima acompanhado do deslocamento do ponto de máximo no sentido de menores ângulos de manivela. Como o início da combustão se mantém, o efeito adverso de aumentar o trabalho de compressão é menor neste caso. Embora uma maior duração na combustão conduza a pressões mais elevadas após 20° , o movimento descendente do pistão faz com que esse efeito seja pouco visível na escala da figura.

Mantidos constantes o ponto de ignição e a duração da combustão, a Figura 5.26 mostra como o fator de forma da função de Wiebe afeta a evolução da pressão na combustão para o caso base da versão a álcool. Um valor baixo do fator de forma conduz a uma maior velocidade de queima na fase inicial da combustão; com isto, a maior parte da massa de mistura reage nos primeiros momentos e a pressão máxima se torna elevada. Simultaneamente, ocorre um aumento no trabalho de compressão. Valores muito altos para o fator de forma deslocam o grosso da combustão para os momentos finais do processo. No caso apresentado, o movimento descendente do pistão impede que a pressão máxima seja muito alta quando o fator de forma é alto. Da mesma forma que nos casos anteriores (ponto de ignição e duração da combustão), ocorre a inversão das curvas de pressão para ângulos de manivela maiores

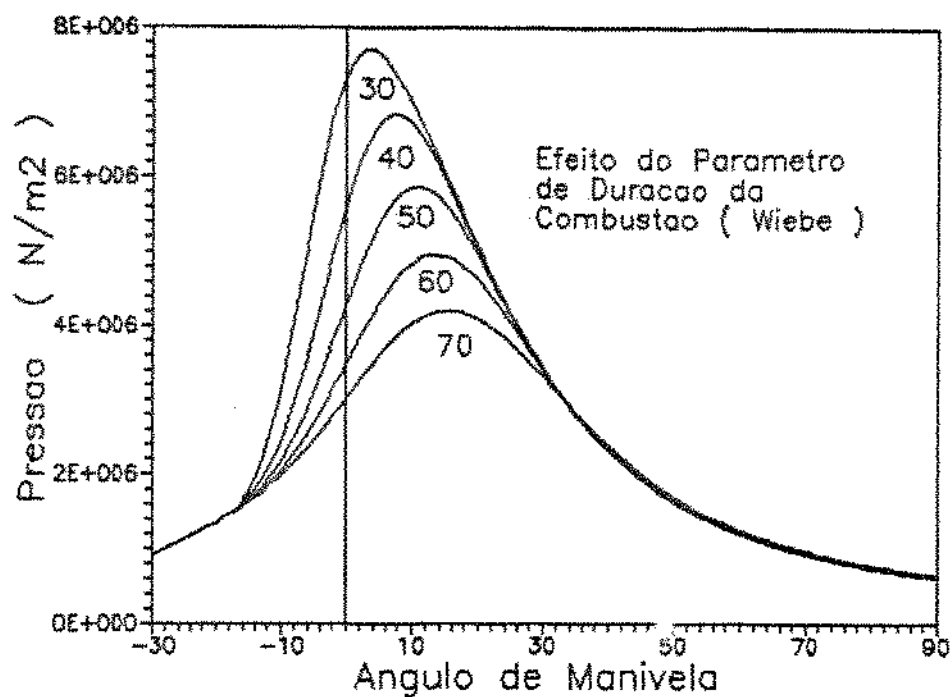


Figura 5.25 - O efeito do parâmetro de duração.

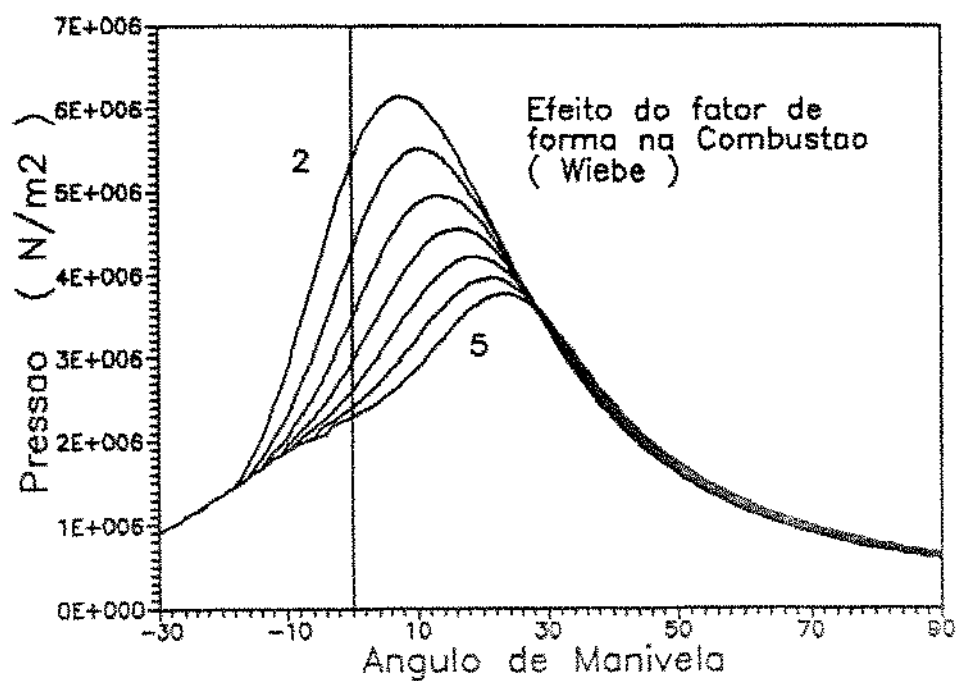


Figura 5.26 - O efeito do fator de forma.

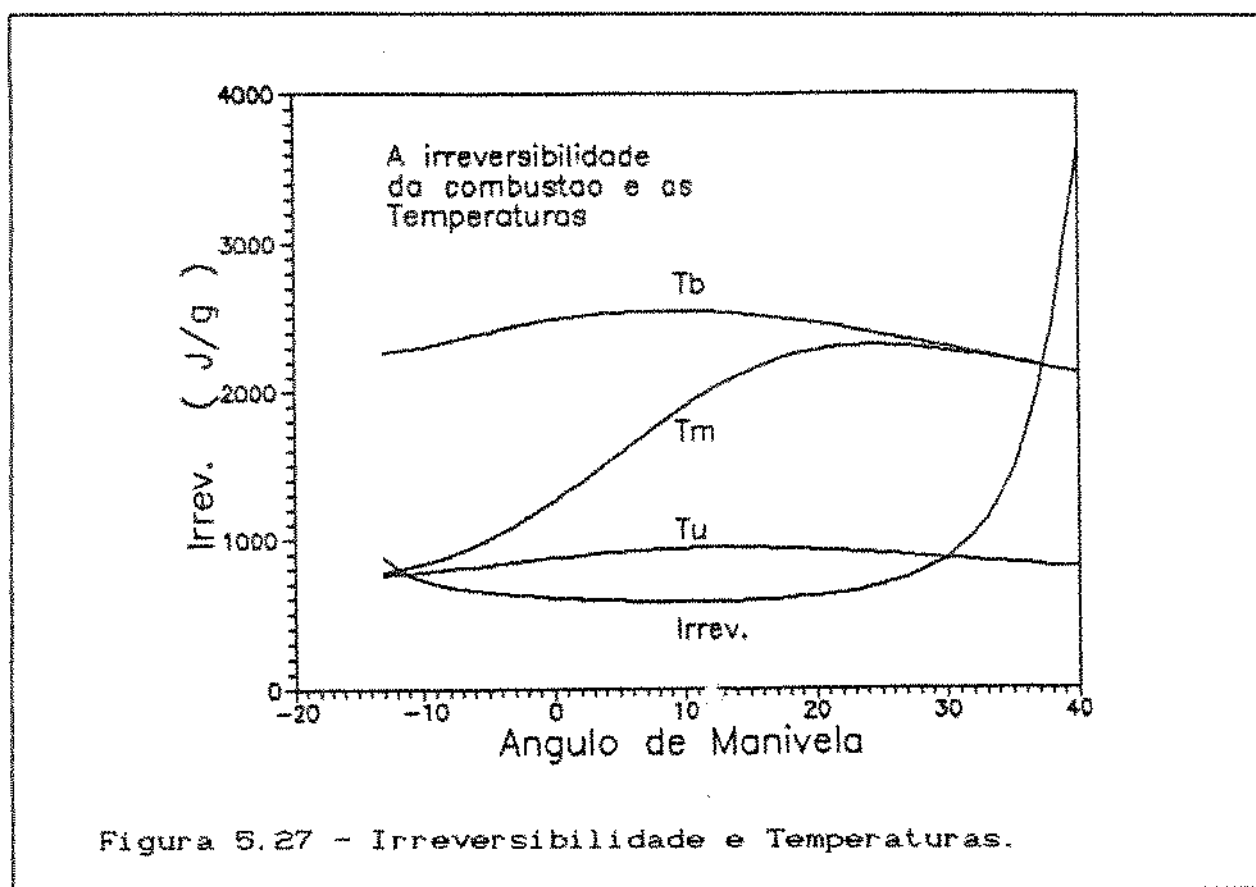
que cerca de 20° .

Em um estudo realizado para motores diesel, Van Gerpen e Shapiro [29] analisaram o efeito do ponto de injeção sobre a irreversibilidade da combustão e constataram que, embora haja uma diferença significativa na evolução da curva da irreversibilidade integral com o ângulo de manivela, os valores finais de irreversibilidade total no processo de combustão são muito próximos. O mesmo fato foi verificado pelos autores quanto à forma da taxa de liberação de energia.

Em um trabalho a ser publicado, Velásquez e Milanez [188] constataram - também para motores diesel - que a irreversibilidade por unidade de massa de combustível que queima possui um perfil característico, com um ponto de mínimo quando a temperatura média termodinâmica é máxima. Em outras palavras, a combustão tende a uma reação reversível à medida que a temperatura sobe.

No presente trabalho, que trata com motores de ignição por centelha e prevê uma estratificação da massa de gases em duas regiões - mistura não queimada e gases de combustão - esse mesmo fato pode ser analisado por outro ângulo, como mostrado na Figura 5.27. Esta figura apresenta, de forma combinada, as temperaturas da região de gases queimados T_b , da região de mistura não queimada T_u e a média termodinâmica T_m junto à irreversibilidade por unidade de massa que queima no intervalo. Da figura é possível perceber que a irreversibilidade por unidade de massa mínima não está associada à temperatura média termodinâmica máxima e sim à temperatura da região queimada máxima.

Outro fato digno de nota reside no formato das curvas de irreversibilidade por unidade de massa: a Figura 5.27 indica um forte aumento da irreversibilidade por unidade de massa nos últimos momentos da combustão. Comparando-se os valores de irreversibilidade com os do trabalho acima citado, verifica-se que ainda assim os valores máximos da Figura 5.27 são substancialmente menores. Essa diferença reside na própria forma de realização física da combustão nos dois tipos de motores (diesel versus ignição por centelha). No caso do motor diesel a combustão ocorre em duas fases bem distintas, como já foi comentado no Capítulo 4. Na primeira, uma certa quantidade de combustível injetado se mistura com o ar e, após o atraso de ignição, queima rapidamente,



com as características de uma chama pré-misturada; na segunda fase a combustão é controlada pela velocidade de mistura entre o combustível e o ar e possui as características de uma chama difusiva. No caso dos motores de ignição por centelha a combustão ocorre por propagação de chama em uma mistura previamente preparada, um processo com menor irreversibilidade.

Nas Figuras 5.28 a 5.30 são mostrados - para o motor a gasolina - os efeitos do ponto de ignição, da duração da combustão e do fator de forma da função de Wiebe sobre a irreversibilidade por unidade de massa que queima. Nas mesmas figuras são também mostradas as temperaturas da região queimada correspondente.

Na primeira figura é mostrado o efeito do ponto de ignição sobre a irreversibilidade por unidade de massa que queima. São apresentados o caso base, o início da combustão a 680° e a 710° . Um fato interessante é que há uma faixa em que a irreversibilidade é baixa e aproximadamente a mesma para todos os casos apresentados, embora o mínimo esteja sempre junto à máxima temperatura da região queimada.

O efeito da duração da combustão pode ser visto na Figura

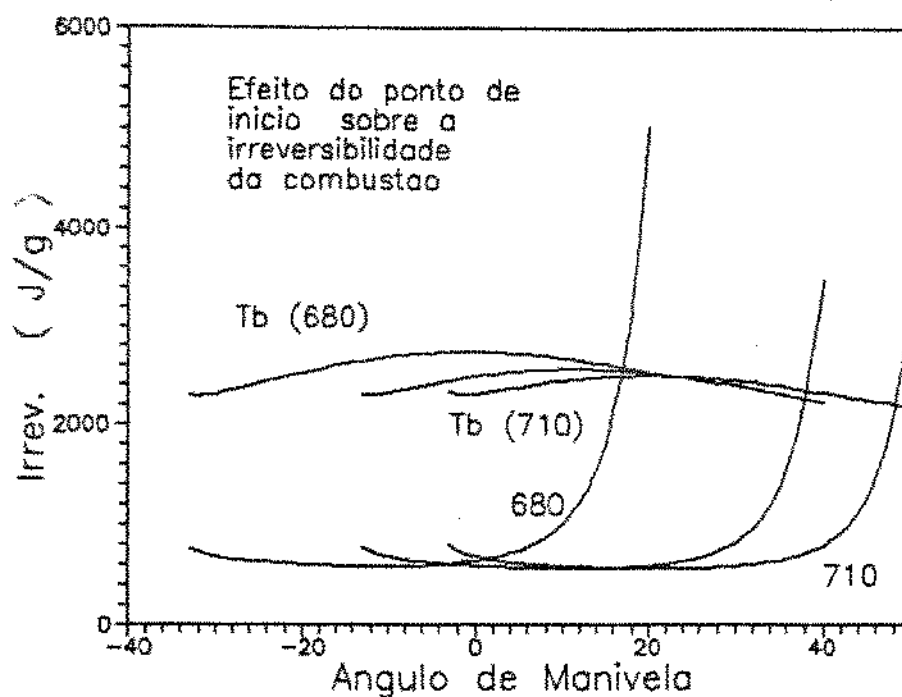


Figura 5.28 - O efeito do ponto de ignição sobre a irreversibilidade por unidade de massa que queima.

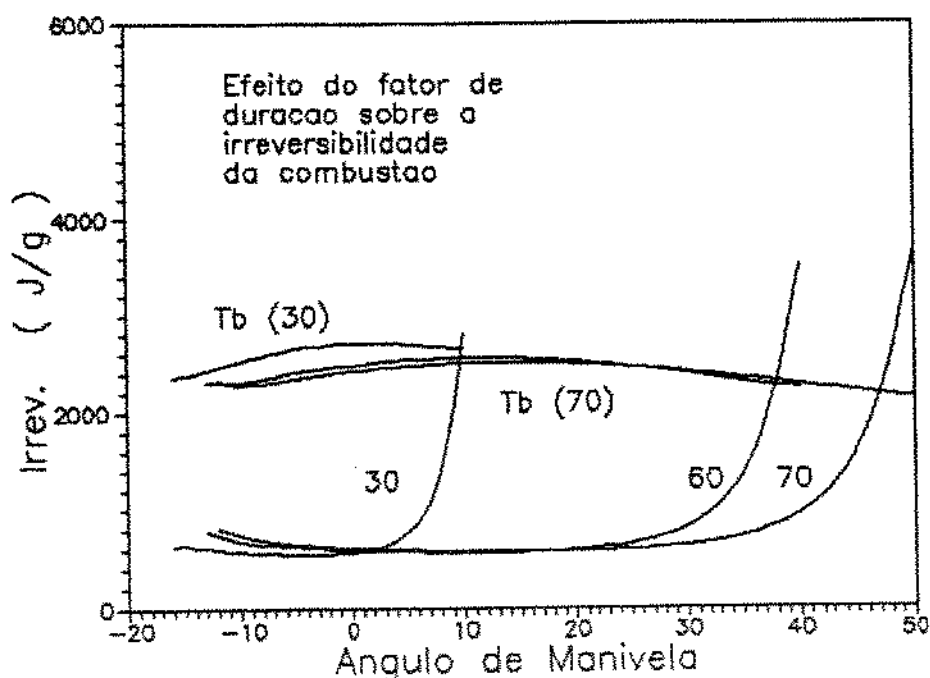


Figura 5.29 - O efeito do parâmetro de duração sobre a irreversibilidade por unidade de massa que queima.

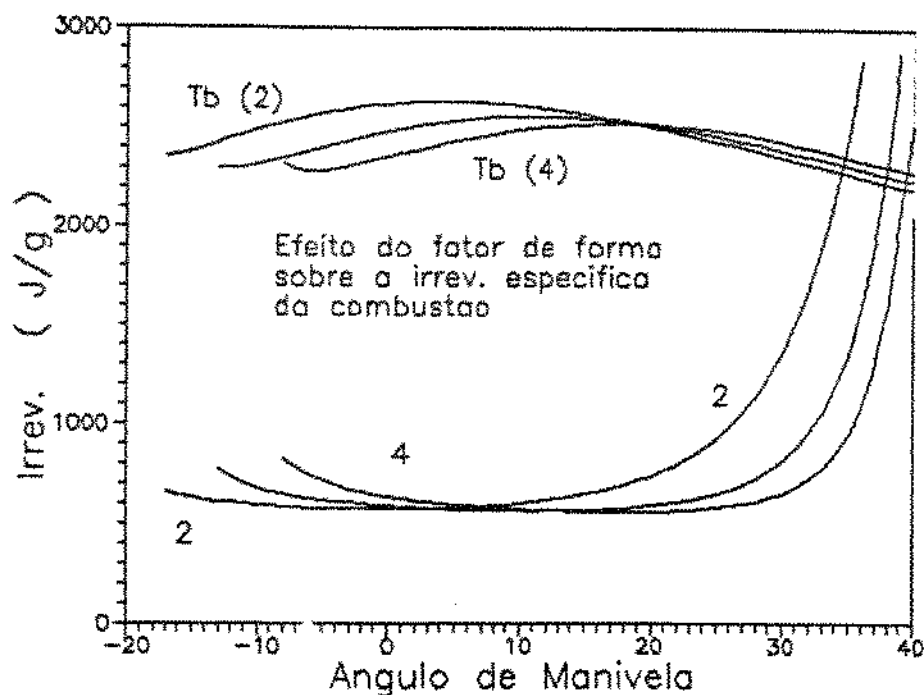


Figura 5.30 - O efeito do fator de forma sobre a irreversibilidade por unidade de massa que queima.

5.29. Novamente, além do caso base foram incluídas duas durações diferentes: 30° e 70° . As curvas de irreversibilidade por unidade de massa de mistura que queima ainda mostram as mesmas características da figura anterior. No final da combustão, a inclinação das curvas de irreversibilidade são menores quando a duração da combustão é maior.

O efeito do fator de forma está apresentado na Figura 5.30. Quando o fator de forma possui um valor menor, a velocidade de queima é maior no início da combustão e quando maior, a maior velocidade de queima ocorre no final do processo. Grandes velocidades de queima associadas a uma temperatura de região queimada menor produzem maior inclinação na curva de irreversibilidade por unidade de massa queimada, como indicado na figura.

Os parâmetros da função de Wiebe afetam não apenas a combustão mas, indiretamente, todo o ciclo ao modificar as condições iniciais para o processo seguinte. As Tabelas 5.4 a 5.7 mostram o efeito de cada parâmetro sobre o balanço global exergético expresso em termos percentuais.

Tabela 5.4 - A influência do ponto de ignição sobre o balanço exergetico global. Motor a álcool.

TEF (Wiebe)	Ex_E	WL	Ex_Q	Ex_S	Dest.
680	1.	0,3145	0,1166	0,2450	0,3239
685	1.	0,3462	0,1069	0,2380	0,3089
690	1.	0,3673	0,0990	0,2359	0,2976
695	1.	0,3793	0,0926	0,2384	0,2897
700	1.	0,3827	0,0876	0,2447	0,2849
705	1.	0,3792	0,0837	0,2546	0,2825
710	1.	0,3700	0,0807	0,2672	0,2821

É interessante notar que o trabalho líquido do ciclo passa por um máximo para o caso tomado como base e portanto este é o caso com maior eficiência exergetica (considerando apenas o trabalho). Por outro lado, a exergia associada à transmissão de calor dos gases para o cilindro aumenta à medida que o ponto de ignição é avançado. A exergia que deixa o motor nos gases de escape Ex_Q é composta por uma ponderável fração de exergia química e possui um mínimo na faixa varrida. Embora o termo de destruição de exergia seja crescente com o avanço do ponto de ignição, isto não significa que a menor irreversibilidade seja desejável sempre - o que indicaria que o início da combustão deveria ser atrasado - uma vez que, em geral, a exergia da transmissão de calor e a dos gases de escape não são aproveitadas.

As mesmas características surgem quando se analisa o efeito da duração da combustão (Tabela 5.5). Já na Tabela 5.6, onde o efeito do fator de forma é explorado, surgem alguns resultados diferentes: a exergia que sai com os gases de escape é tanto maior quanto mais alto é o fator de forma e o inverso ocorre para a destruição de exergia. Cumpre relembrar que quando o fator de

Tabela 5.5 - O efeito do parâmetro de duração sobre o balanço exergetico global. Motor a álcool.

TEB (Wiebe)	Ex _E	W _L	Ex _a	Ex _s	Dest.
30	1.	0,3437	0,1040	0,2443	0,3069
40	1.	0,3696	0,0964	0,2390	0,2950
50	1.	0,3821	0,0910	0,2391	0,2878
60	1.	0,3827	0,0876	0,2447	0,2849
70	1.	0,3752	0,0855	0,2545	0,2849

Tabela 5.6 - O efeito do fator de forma sobre o balanço exergetico global. Motor a álcool.

n (Wiebe)	Ex _E	W _L	Ex _a	Ex _s	Dest.
2,0	1.	0,3782	0,0949	0,2351	0,2918
2,5	1.	0,3828	0,0905	0,2394	0,2873
3,0	1.	0,3827	0,0876	0,2447	0,2849
3,5	1.	0,3808	0,0951	0,2507	0,2834
4,0	1.	0,3771	0,0836	0,2564	0,2830
4,5	1.	0,3732	0,0821	0,2621	0,2826
5,0	1.	0,3692	0,0811	0,2676	0,2821

Tabela 5.7 - Efeito dos parâmetros da função de Wiebe sobre o balanço exergetico global. Motor a gasolina.

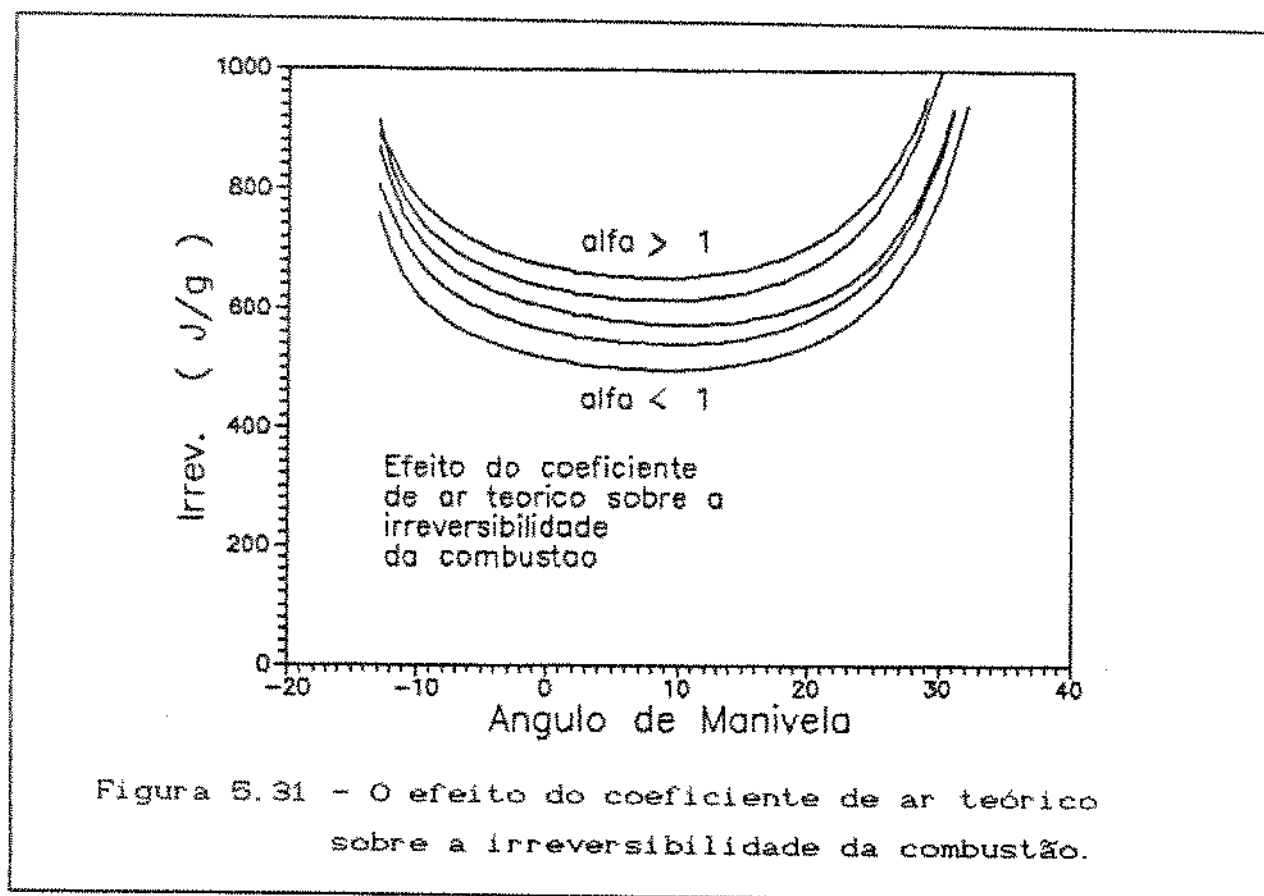
Var.	Valor	Ex_E	W_L	Ex_Q	Ex_S	Dest.
-----	Base	1,0	0,3332	0,0795	0,3002	0,2870
N	2	1,0	0,3283	0,0767	0,3094	0,2856
	4	1,0	0,3312	0,0843	0,2929	0,2915
TEB	30	1,0	0,3043	0,0910	0,3019	0,3029
	70	1,0	0,3270	0,0780	0,3079	0,2870
TEF	680	1,0	0,2842	0,0995	0,3019	0,3143
	710	1,0	0,3224	0,0747	0,2851	0,2870

forma aumenta, as pressões e temperaturas no início da expansão são maiores e isto afeta inclusive a fase aberta do ciclo.

A Tabela 5.7 mostra, de forma condensada, os efeitos dos três parâmetros da função de Wiebe para a versão a gasolina. O caso base é indicado na primeira linha. O trabalho líquido e a exergia associada à transmissão de calor neste caso são sempre menores do que para o motor a álcool, o que já era esperado dado que o motor a álcool trabalha com uma taxa de compressão mais elevada e atinge pressões e temperaturas mais altas. A destruição de exergia, porém, é da mesma ordem para os dois casos e portanto o motor a gasolina apresenta uma maior exergia nos gases de escape.

Os efeitos do ponto de ignição e do parâmetro de duração não diferem do que já foi comentado para o motor a álcool. Todavia, o parâmetro de forma apresenta tendências opostas às verificadas, exceto quanto ao trabalho líquido: a exergia associada à transmissão de calor aumenta, a exergia que sai com os gases de escape diminui e a irreversibilidade aumenta quando o fator de forma possui valores crescentes.

O efeito do coeficiente de ar teórico sobre a irreversibilidade por unidade de massa que queima pode ser visto na Figura 5.31. Quando a mistura é empobrecida, as pressões e temperaturas



se tornam cada vez mais baixas e isto faz com que a irreversibilidade aumente. Este fato foi também observado por Primus et alii [25] ao compararem - para uma mesma pressão máxima admissível - uma versão turboalimentada de um motor diesel com a versão de aspiração natural: o motor turboalimentado operava com uma relação ar-combustível global menor e apresentou maior irreversibilidade na combustão.

5.5 - ANÁLISE EXERGÉTICA DA FASE ABERTA DO CICLO

O modelo de simulação permite que se estude os processos de admissão e exaustão, bem como a fase de cruzamento de válvulas. Os efeitos de inércia dos gases e de direcionamento do escoamento, todavia, não estão incluídos.

Nas Figuras 5.32 e 5.33 são apresentadas as curvas de fluxo de massa em função do ângulo de manivela para os processos de escape e admissão, em duas rotações distintas (5200 e 2000 rpm).

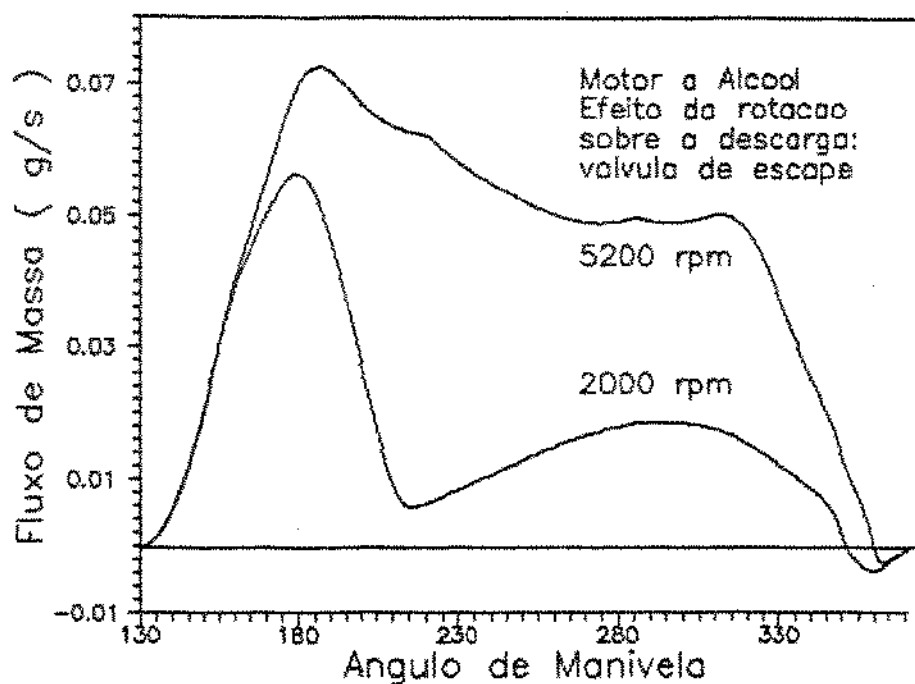


Figura 5.32 - O fluxo de massa através da válvula de escape. Motor a álcool.

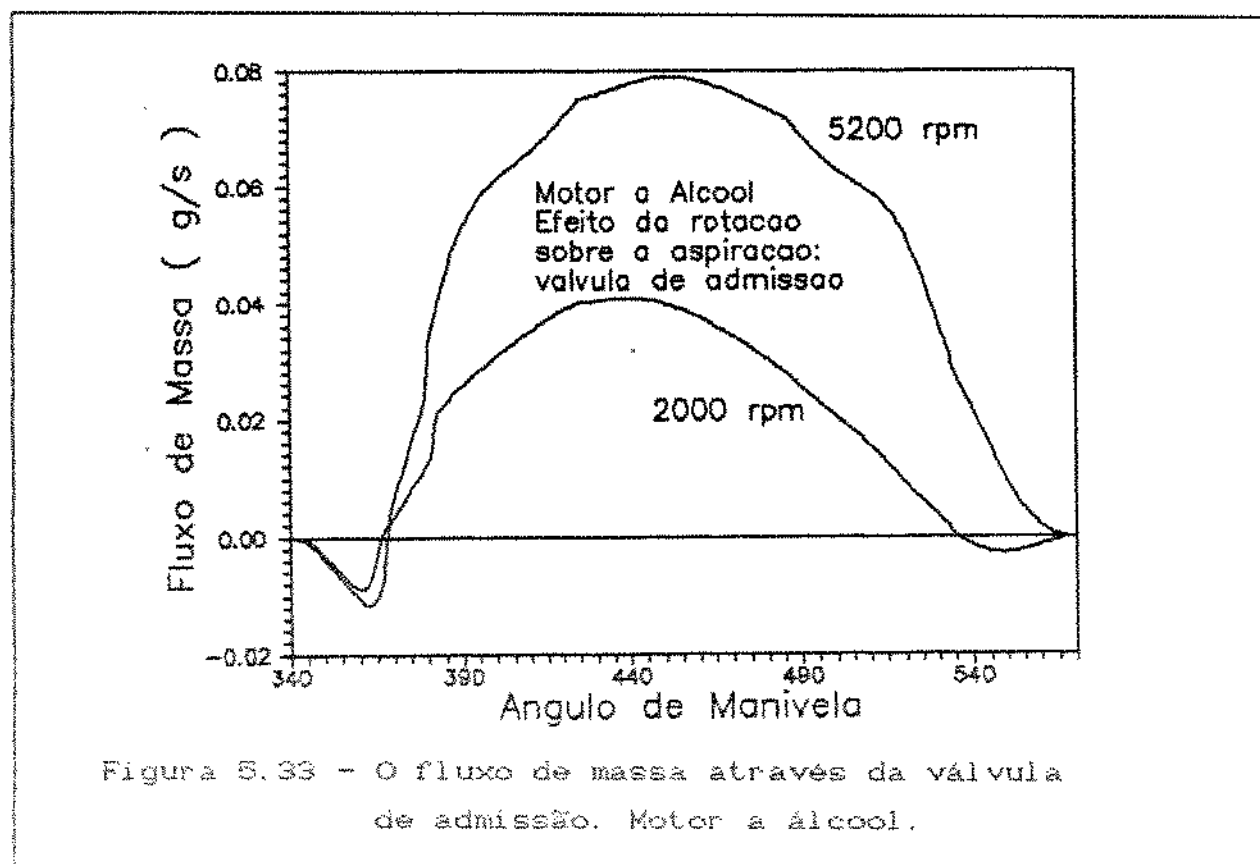
Da primeira figura pode-se notar a grande diferença que existe no fluxo de massa de escape quando se varia a rotação do motor. Embora o fluxo de massa através da válvula de escape aumente quando a rotação do motor aumenta - pois a maior velocidade instantânea do pistão induz um vácuo maior dentro do cilindro - a massa que efetivamente deixa o cilindro por grau de ângulo de manivela é menor, pois o intervalo de tempo disponível para o escoamento também é menor.

Como já foi mostrado pelo diagrama de mola fraca (Figura 5.22), o escape espontâneo (*blow - down*) é muito mais rápido quando a rotação é menor: a pressão interna ao cilindro cai rapidamente e se aproxima da pressão do coletor de escape, reduzindo o fluxo de massa consideravelmente. O segundo pico que aparece na curva correspondente a 2000 rpm é devido ao vácuo produzido pelo pistão quando sua velocidade instantânea é alta. Já para a rotação mais elevada, não há tempo suficiente para o escape espontâneo evoluir muito e, quando o pistão retorna, ainda há uma massa de gases residuais considerável no cilindro; com

isso, a pressão interna é bem maior do que no caso anterior e portanto o fluxo de massa também é substancialmente maior.

O processo de escape é apresentado por inteiro, incluindo a fase de cruzamento de válvulas - isto é, a fase em que a válvula de admissão já abandonou sua sede. Quando a válvula de admissão começa a abrir, coloca em comunicação o coletor de escape com o coletor de admissão através das válvulas de admissão e escape. Dada a hipótese de pressões de coletores constantes, ocorre um escoamento reverso do coletor de escape para o cilindro (e deste para o coletor de admissão, como será mostrado na próxima figura). Embora o diagrama de mola fraca (Figura 5.22) indique que na fase de cruzamento de válvulas a pressão varie mais no caso de rotações mais elevadas, novamente o tempo disponível para o escoamento é baixo e o escoamento reverso é menor.

Na figura 5.33 é apresentada a vazão em massa através da válvula de admissão em função do ângulo de manivela. Sempre há escoamento reverso no início do processo, uma vez que a pressão dentro do cilindro é maior do que a pressão de admissão. Também



aqui valem as observações feitas para o processo de escape: embora o fluxo de massa seja maior para rotações maiores, isto indica apenas que o pistão produz um vácuo maior e o escoamento não tem tempo para responder a essa maior depressão. Contribuem para a rápida elevação da vazão em massa vários efeitos: uma área mínima de escoamento cada vez maior causada pela elevação da válvula, bem como uma maior velocidade instantânea do pistão, que aumenta a relação de pressões.

Ao fim do processo de admissão também surge o escoamento reverso. No caso da rotação elevada, os valores de vazão reversa são muito baixos e não podem ser vistos na escala do gráfico. O escoamento reverso no final do processo de admissão significa uma inadequação do sincronismo de válvulas. Todavia, é necessário um compromisso: se o sincronismo for adequado para as altas rotações, certamente não o será para as baixas rotações. Embora não sejam apresentados, resultados análogos para o motor a gasolina com o mesmo sincronismo de válvulas mostram que este está mais adequado, uma vez que não ocorre escoamento reverso para as altas rotações.

O efeito individual de cada momento relevante do sincronismo de válvulas (abertura da válvula de escape, abertura da de admissão e o fechamento de cada uma) é apresentado através das Tabelas 5.8 a 5.11, onde duas rotações estão representadas. Os parâmetros apresentados nessas tabelas são a rotação, a fração de gases residuais, o rendimento volumétrico, a pressão média indicada e as eficiências exergéticas para os processos de escape, admissão e para a fase aberta como um todo, tal como definidos no Capítulo 4.

Na Tabela 5.8 fica clara a necessidade de um compromisso entre as altas e as baixas rotações: caso se pretenda otimizar o ângulo de abertura da válvula de escape para as baixas rotações, haverá um sacrifício no desempenho em altas rotações, pois os valores máximos da pressão média indicada não ocorrem para o mesmo ângulo.

Alguns fatos merecem destaque. Como esperado, a eficiência exergética da admissão apresenta um comportamento qualitativamente semelhante ao do rendimento volumétrico, com os valores numericamente menores devido à inclusão do trabalho líquido necessá-

Tabela 5.8 - O efeito do ponto de abertura da válvula de escape. Motor a álcool.

rpm	5200				2000			
AVE	110	130	150	180	110	130	150	180
f	0,0570	0,0549	0,0537	0,0536	0,0622	0,0633	0,0644	0,0667
η_v	0,6875	0,6890	0,6908	0,6904	0,7407	0,7381	0,7372	0,7340
P_{mi}	9,326	9,273	9,121	8,652	9,991	10,027	10,002	9,784
ϵ_{ES}	0,9497	0,9418	0,8856	0,8123	0,9194	0,9583	0,9604	0,9153
ϵ_{AD}	0,6214	0,6231	0,6251	0,6248	0,6745	0,6723	0,6716	0,6687
ϵ_{AB}	0,6338	0,6272	0,6225	0,6132	0,6786	0,6809	0,6759	0,6683

rio no denominador - equação (4.88). A eficiência exergética do processo de escape por si só não permite que se determine o ponto ótimo de desempenho: a máxima eficiência exergética de escape não coincide necessariamente com a maior pressão média indicada, uma vez que o ponto de abertura da válvula de escape não afeta apenas o processo de escape. Por um motivo análogo, nem o rendimento volumétrico nem a eficiência exergética da admissão conseguem definir o ponto de ótimo. Ao medir, de forma combinada, a eficiência do escape e da admissão, a eficiência exergética para a fase aberta é o parâmetro que permite determinar o ponto ótimo para a abertura da válvula de escape em uma dada rotação, uma vez que ele acompanha a tendência da pressão média indicada.

A Tabela 5.9 indica que o sincronismo escolhido para o caso base não é o mais adequado sequer para a máxima rotação. A abertura da válvula de admissão em 340° parece ser excessivamente prematura. Considerando apenas a rotação elevada, o ponto mais interessante parece estar por volta de 350° ; por outro lado, caso o interesse seja otimizar o comando de válvulas para as baixas rotações, o mais indicado seria pouco antes de 360° . Mesmo para as rotações baixas, não há vantagem em retardar a abertura da válvula de admissão para além do ponto morto superior (360°).

Tabela 5.9 - O efeito do ponto de abertura da válvula de admissão. Motor a álcool.

rpm	5200				2000			
AVA	340	350	360	370	340	350	360	370
f	0,0548	0,0508	0,0500	0,0504	0,0633	0,0522	0,0486	0,0487
η_v	0,6890	0,6914	0,6885	0,6791	0,7381	0,7479	0,7518	0,7465
P_{mi}	9,273	9,301	9,241	9,065	10,027	10,182	10,238	10,141
ϵ_{ES}	0,9418	0,9419	0,9413	0,9404	0,9583	0,9584	0,9583	0,9674
ϵ_{AD}	0,6231	0,6275	0,6257	0,6169	0,6723	0,6897	0,6865	0,6815
ϵ_{AB}	0,6272	0,6292	0,6265	0,6176	0,6809	0,6897	0,6931	0,6880

Neste caso, o rendimento volumétrico, a eficiência exergetica da admissão e a eficiência exergetica da fase aberta mostram as mesmas tendências.

O efeito do ponto de fechamento da válvula de escape está indicado na Tabela 5.10. Novamente, se a otimização se faz com base na rotação mais elevada, ocorre o sacrifício do desempenho em baixas rotações, devido ao escoamento reverso do coletor de escape para o cilindro e deste para o coletor de admissão. Este escoamento reverso é tanto maior quanto menor for a carga do motor pois a carga é controlada pela redução da pressão do coletor de admissão. Também aqui se verificam as mesmas tendências para o rendimento volumétrico e para as eficiências exergeticas de admissão e da fase aberta.

Na tabela 5.11 são apresentados os resultados obtidos quando se varia o ponto de fechamento da válvula de admissão, também para a versão a álcool. Caso o interesse esteja focado em alto desempenho, os resultados indicam que o fechamento da válvula de admissão poderia ser ainda mais retardado, um vez que todos os indicadores mostram-se em ascensão (pressão média indicada, rendimento volumétrico, eficiências exergeticas de admissão e da fase aberta). Todavia, os resultados para 2000 rpm não deixam dúvida que o desempenho em baixas rotações iria piorar.

Tabela 5.10 - O efeito do ponto de fechamento da
válvula de escape. Motor a álcool.

rpm	5200				2000			
FVE	360	370	375	380	360	370	375	380
f	0,0889	0,0597	0,0549	0,0557	0,0577	0,0579	0,0633	0,0711
η_v	0,6606	0,6845	0,6890	0,6878	0,7466	0,7451	0,7381	0,7274
P_{mi}	8,759	9,194	9,273	9,259	10,147	10,135	10,027	9,862
ϵ_{ES}	0,9122	0,9421	0,9418	0,9399	0,9619	0,9603	0,9583	0,9557
ϵ_{AD}	0,5946	0,6185	0,6231	0,6226	0,6794	0,6785	0,6723	0,6629
ϵ_{AB}	0,6013	0,6232	0,6272	0,6263	0,6884	0,6871	0,6809	0,6713

Tabela 5.11 - O efeito do ponto de fechamento da
válvula de admissão. Motor a álcool.

rpm	5200				2000			
FVA	540	560	570	580	540	560	570	580
f	0,0627	0,0568	0,0549	0,0535	0,0670	0,0642	0,0632	0,0624
η_v	0,6020	0,6661	0,6890	0,7035	0,7318	0,7435	0,7381	0,7296
P_{mi}	8,074	8,962	9,273	9,470	9,935	10,104	10,027	9,908
ϵ_{ES}	0,9395	0,9417	0,9418	0,9420	0,9583	0,9582	0,9583	0,9586
ϵ_{AD}	0,5446	0,6025	0,6231	0,6363	0,6665	0,6772	0,6723	0,6646
ϵ_{AB}	0,5498	0,6069	0,6272	0,6402	0,6749	0,6859	0,6809	0,6730

A fim de explorar o efeito combinado dos pontos de abertura e fechamento das válvulas, foram definidos três casos com diferentes sincronismos de válvulas. O caso 1 corresponde ao sincronismo do modelo de admissão e escape idealizado: as válvulas abrem e fecham sempre nos pontos de máximo e mínimo volumes: a válvula de escape abre a 180° , o fechamento da válvula de escape e a abertura da de admissão ocorrem a 360° e o fechamento da válvula de admissão se completa a 540° . O caso 2 trabalha com os mesmos valores de abertura da válvula de escape e fechamento da válvula de admissão que o caso base (130° e 570° respectivamente) mas com um período de cruzamento menor: a válvula de admissão inicia a abertura em 355° e a de escape fecha completamente a 365° . Com esses valores, o período de cruzamento se reduz para apenas 10° , enquanto para o caso base é de 35° . O caso indicado como 3 é o caso base.

A Tabela 5.12 mostra os resultados para os diferentes sincronismos. O primeiro sincronismo é claramente deficiente mesmo para as baixas rotações. Os dois outros apresentam-se vantajosos cada qual para um dos extremos de pressão.

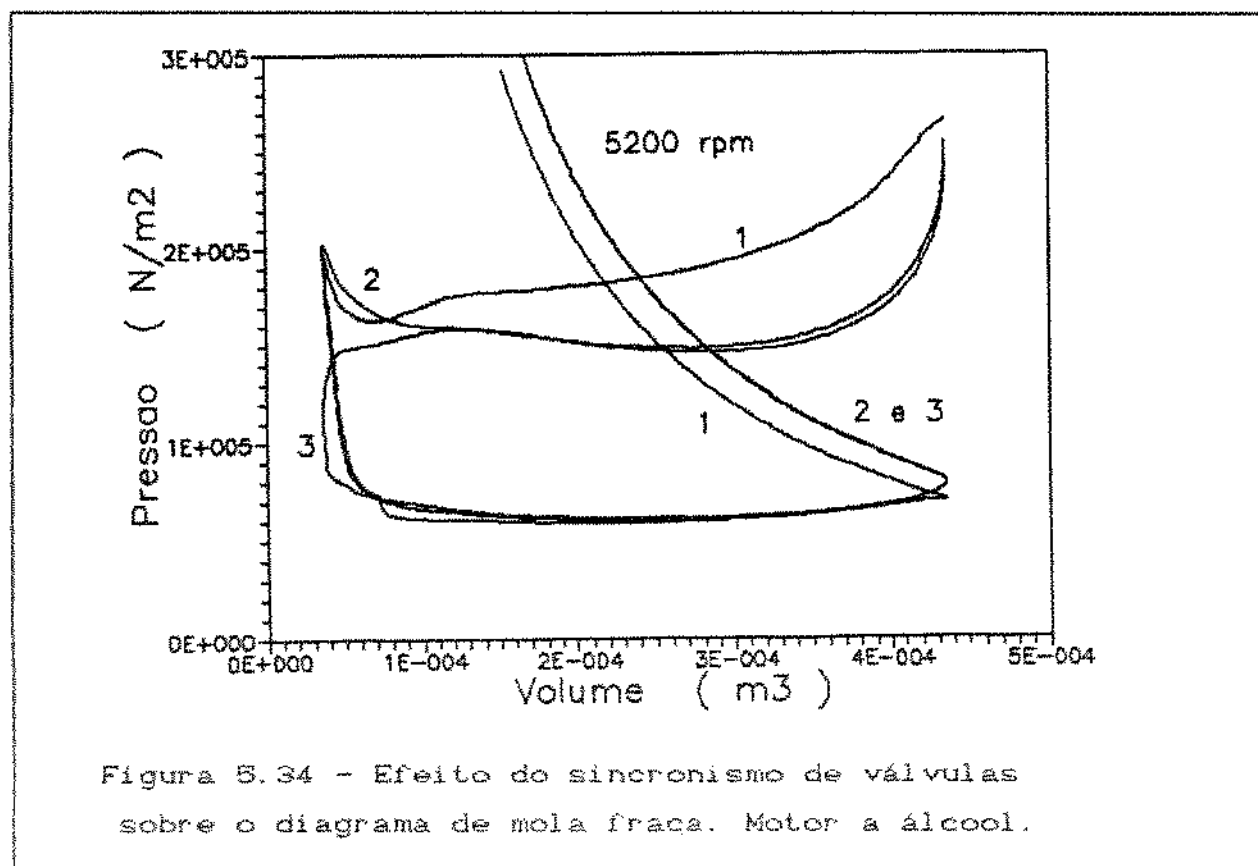
A fim de visualizar o que pode ocorrer quando se altera o sincronismo de válvulas, a Figura 5.34 apresenta o diagrama de

Tabela 5.12 - O efeito do cruzamento de válvulas.
Motor a álcool.

rpm	5200			2000		
Caso	1	2	3	1	2	3
f	0,0794	0,0716	0,0549	0,0526	0,0497	0,0633
η_v	0,5816	0,6723	0,6890	0,7457	0,7565	0,7381
P_{mi}	7,304	8,972	9,273	9,983	10,305	10,027
ϵ_{ES}	0,8030	0,9221	0,9418	0,9148	0,9583	0,9583
ϵ_{AD}	0,5277	0,6089	0,6231	0,6806	0,6903	0,6723
ϵ_{AB}	0,5224	0,6121	0,6272	0,6786	0,6873	0,6809

mola fraca para os três casos acima descritos, a 5200 rpm. A abertura atrasada da válvula de escape do caso 1 faz com que o escape se dê praticamente apenas devido ao movimento do pistão, sem tirar proveito do escape espontâneo. A isso corresponde uma eficiência exergetica de escape substancialmente menor do que os valores típicos. O pico pronunciado que surge no final do processo de escape resulta da ação combinada do movimento do pistão com uma área disponível para o escoamento muito baixa, devido a válvula de escape estar muito próxima de sua sede. Um motivo análogo faz com que a pressão caia muito no início do processo de admissão e não suba tanto como nos demais casos no final da admissão. Com isso, a compressão se inicia a partir de uma pressão menor e a parte fechada do ciclo também é afetada desfavoravelmente.

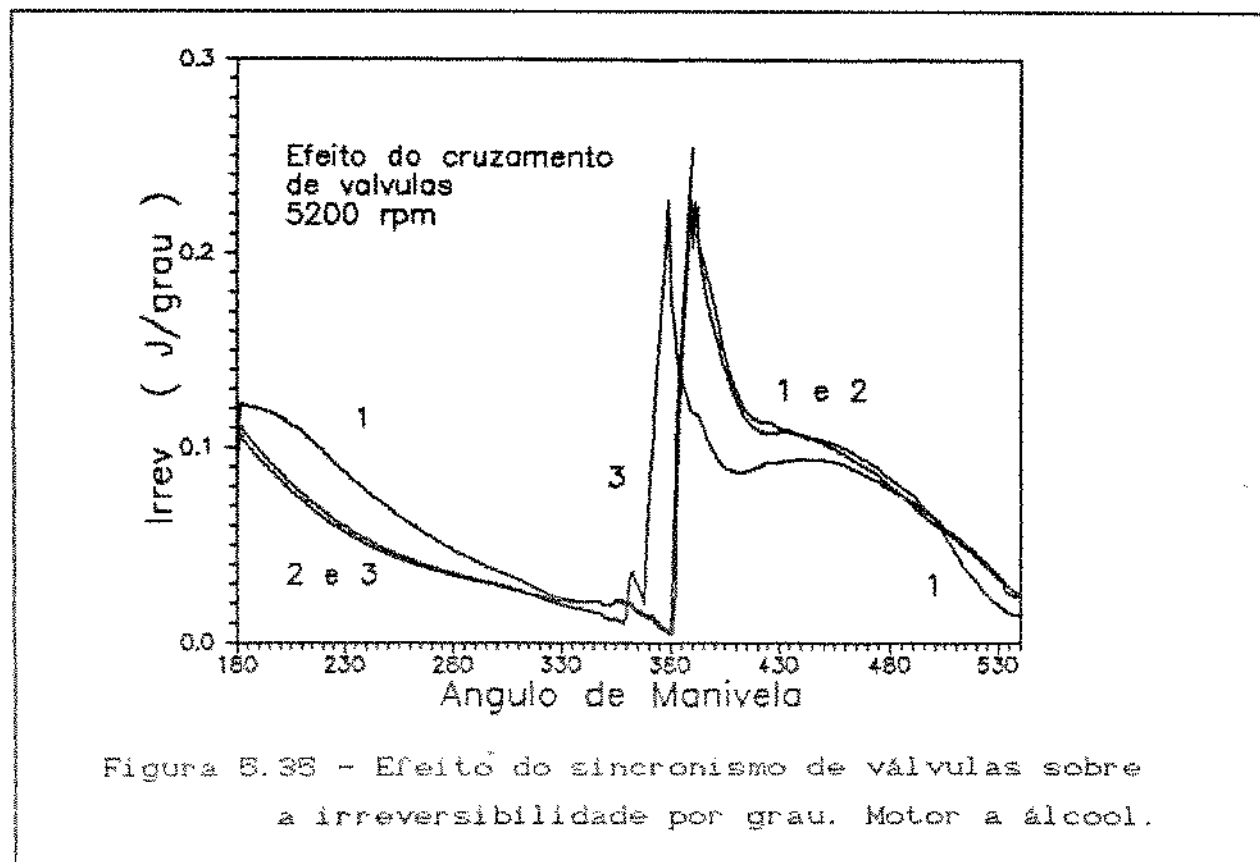
O caso 2 também apresenta problemas durante a fase de cruzamento de válvulas, quando praticamente coincide com o caso 1, embora não possua uma depressão tão grande como aquele no início da admissão. Uma melhora considerável poderia ser obtida mantendo-se a abertura da válvula de admissão e retardando um pouco o



fechamento da de escape. Nas demais fases, este caso não difere substancialmente do caso base. É evidente que as vantagens e desvantagens relativas aqui tratadas podem se inverter caso o objetivo seja otimizar o sincronismo de válvulas para as rotações mais baixas.

Na Figura 5.35 se mostra o que ocorre com a irreversibilidade por grau durante a fase aberta para os casos acima descritos. O caso 1 com certeza é o que maior irreversibilidade produz, visto que em praticamente toda a fase aberta ele apresenta maior irreversibilidade por grau. O caso 2 acompanha o caso 1 no pico de irreversibilidade associado ao período de cruzamento de válvulas e no início do processo de admissão.

Um dos poucos trabalhos que empregam a análise de segunda lei para motores [26] apresenta uma figura do fluxo de massa e da irreversibilidade por grau para um motor diesel na fase de admissão. Também lá se nota o pico de pressão associado a fase de cruzamento de válvulas e no início de admissão. Esse pico se deve em parte a uma variação muito rápida de pressão associada a um escoamento



mento reverso durante a fase de cruzamento de válvulas e em parte ao vigoroso processo de mistura entre os gases residuais e a mistura fresca que começa a entrar no cilindro durante a primeira parte da admissão. À medida que os gases residuais vão sendo resfriados e que a maior parte dos gases passa a ser ar e vapor de combustível, a irreversibilidade por grau diminui.

Todas as tendências observadas pela análise paramétrica aqui relatada para a fase aberta - no que se refere ao rendimento volumétrico e ao desempenho do motor em função do sincronismo de válvulas - coincidem com as tendências encontradas na literatura como, por exemplo, no clássico livro de Taylor [189] ou no recente trabalho de Asmus [190].

O efeito das pressões médias dos coletores de admissão e escape sobre a fase aberta do ciclo são apresentados nas Tabelas 5.13 e 5.14. Da primeira tabela fica claro que, quanto menor for a pressão de escape, melhor será o desempenho do motor, qualquer que seja a rotação considerada. Este conhecido resultado surge devido à redução do trabalho de bombeamento associado ao menor escoamento reverso causado por uma menor diferença de pressões entre os coletores de admissão e escape. Assim, qualquer redução na perda de carga do sistema de escapamento, silencioso ou conversor catalítico é sempre bem-vinda.

Tabela 5.13 - O efeito da pressão do coletor de escape sobre a fase aberta do ciclo. Motor a álcool.

rpm	5200			2000		
Pesc	1,05	1,15	1,25	1,05	1,15	1,25
f	0,0507	0,0549	0,0587	0,0571	0,0633	0,0689
η_v	0,698	0,689	0,685	0,745	0,738	0,725
Pmi	9,461	9,273	9,142	10,229	10,027	9,838
ϵ_{ES}	0,949	0,942	0,933	0,945	0,958	0,973
ϵ_{AD}	0,632	0,623	0,619	0,679	0,672	0,667
ϵ_{AB}	0,636	0,627	0,622	0,689	0,681	0,674

Tabela 5.14 - O efeito da pressão do coletor de admissão sobre a fase aberta do ciclo. Motor a álcool.

rpm	5200				2000			
P_{adm}	0,98	0,86	0,75	0,60	0,98	0,86	0,75	0,60
f	0,0484	0,0549	0,0621	0,0763	0,0538	0,0633	0,0734	0,0917
η_v	0,7994	0,6890	0,5946	0,4638	0,8531	0,7381	0,6347	0,4939
P_{mi}	10,869	9,273	7,877	5,894	11,807	10,027	8,429	6,264
ϵ_{ES}	0,9390	0,9418	0,9411	0,9300	0,9548	0,9583	0,9632	0,9691
ϵ_{AD}	0,7243	0,6231	0,5371	0,4188	0,7793	0,6723	0,5770	0,4487
ϵ_{AB}	0,7263	0,6272	0,5423	0,4248	0,7843	0,6809	0,5843	0,4548

As mesmas observações valem para o caso da pressão média no coletor de admissão (Tabela 5.14), porém em sentido inverso: quando aumenta a pressão no coletor de admissão, todos os indicadores de desempenho melhoram. Da mesma forma, qualquer redução na perda de carga do sistema de admissão é sempre benéfica ao desempenho do motor. No caso de motores de ignição por centelha, porém, o controle da carga é feito exatamente pela pressão de admissão: para reduzir a carga, a borboleta do acelerador se fecha e a pressão no coletor de admissão se reduz. Em outras palavras, a carga é controlada pela redução do rendimento volumétrico. Esse fato determina os baixos valores de rendimento térmico associados à operação do motor de ignição por centelha em cargas baixas.

Já foi mencionado o que ocorre com a pressão quando se reduz a carga de um motor de ignição por centelha durante a combustão (Figura 5.12). As figuras 5.36 a 5.39 mostram os diagramas indicadores para as altas e as baixas pressões em duas rotações diferentes: 5200 e 2000 rpm. Para qualquer das rotações os diagramas indicadores para altas pressões são semelhantes: a compressão inicia a pressões menores para as cargas baixas e essa diferença é amplificada pela taxa de compressão. Todo o ciclo é reduzido e a potência do motor cai, como pode ser observado nas Figuras 5.36 e 5.37.

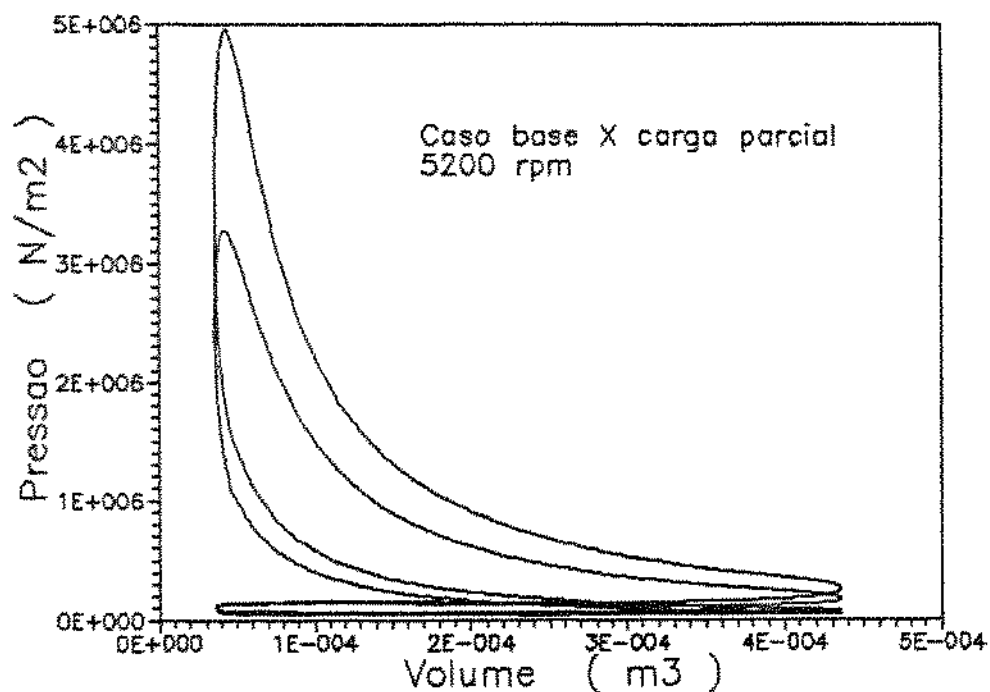


Figura 5.36 - O efeito da carga no diagrama indicador de alta pressão. Motor a álcool, 5200 rpm.

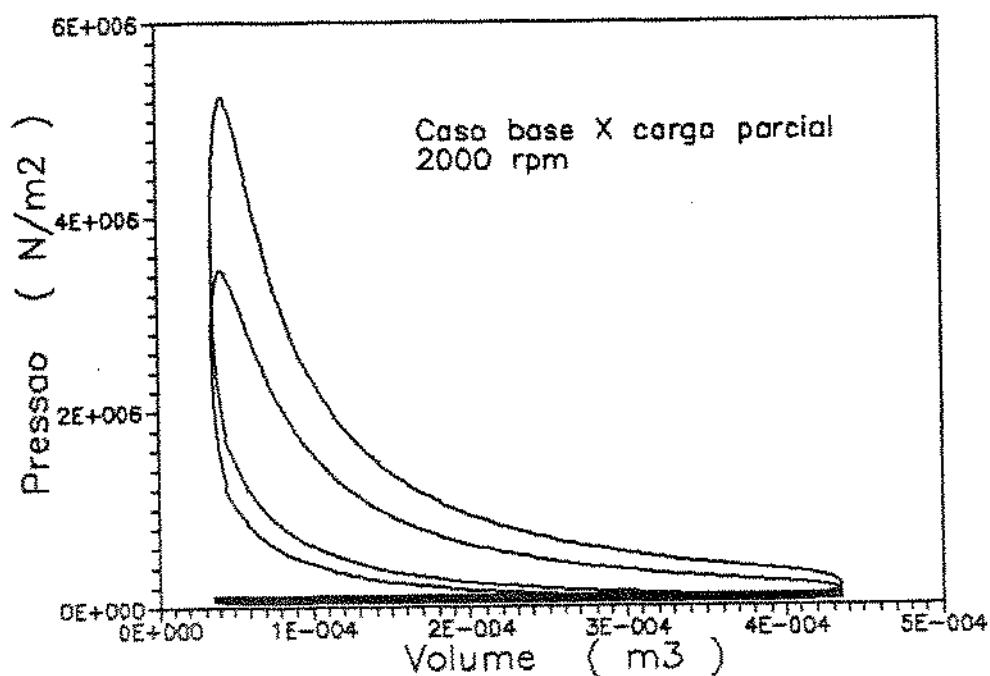


Figura 5.37 - O efeito da carga no diagrama indicador de alta pressão. Motor a álcool, 2000 rpm.

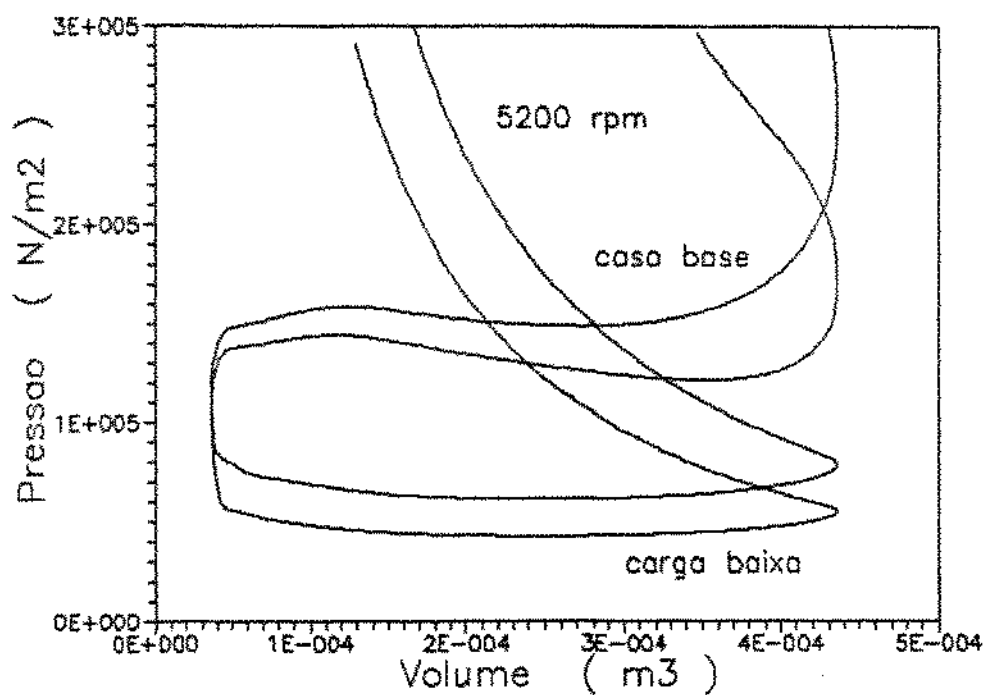


Figura 5.38 - O efeito da carga no diagrama indicador de baixa pressão. Motor a álcool, 5200 rpm.

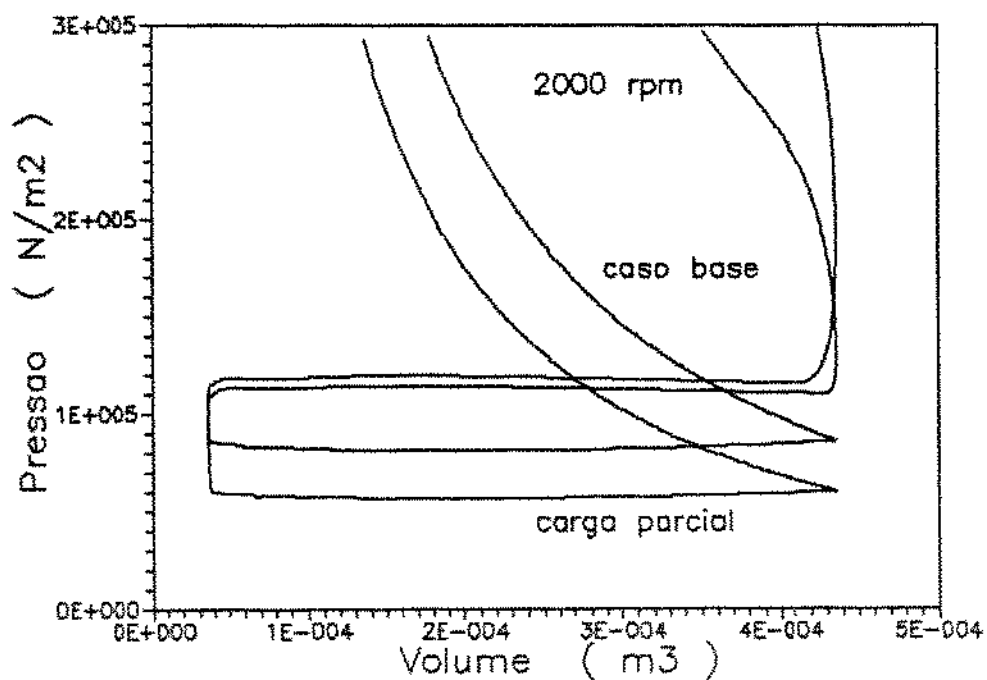


Figura 5.39 - O efeito da carga no diagrama indicador de baixa pressão. Motor a álcool, 2000 rpm.

Os diagramas de mola fraca (Figuras 5.38 e 5.39) mostram claramente a redução na pressão de início da compressão mencionada anteriormente. Quando a rotação é baixa, ocorre ainda um aumento sensível no trabalho de bombeamento, o que reduz ainda mais a potência do motor. O mesmo não ocorre para a alta rotação no exemplo apresentado, uma vez que para a carga baixa o processo de escape é mais eficiente do que para cargas altas. Este fato evidencia novamente que o ponto de abertura da válvula de escape do caso base não está otimizado para altas rotações.

5.6 - COMPARAÇÃO: ALCOOL - GASOLINA

As Tabelas 5.15 e 5.16 apresentam as eficiências exergeticas de cada processo que compõe o ciclo, em função do coeficiente de ar teórico (α), para as versões a álcool e a gasolina, respectivamente. Para os dois motores a eficiência exergetica do processo de compressão (ϵ_{CP}) apresenta valores bastante elevados. Dado que apenas a transmissão de calor é fonte de irreversibilidades neste processo, altos valores de eficiência significam

Tabela 5.15 - A eficiência exergetica de cada processo em função do coeficiente de ar teórico. Motor a álcool.

alfa	0,7566	0,8730	0,9412	0,9842	1,0768	1,1642	1,2688
ϵ_{CP}	0,991	0,989	0,989	0,988	0,987	0,987	0,986
ϵ_{CB}	0,526	0,607	0,660	0,725	0,722	0,719	0,717
ϵ_{EX}	0,842	0,833	0,830	0,829	0,832	0,837	0,843
ϵ_{FE}	0,511	0,527	0,541	0,559	0,550	0,541	0,536
ϵ_{ES}	0,948	0,948	0,945	0,942	0,937	0,932	0,924
ϵ_{AD}	0,607	0,616	0,620	0,623	0,627	0,628	0,630
ϵ_{AB}	0,622	0,620	0,617	0,613	0,609	0,603	0,597
ϵ_G	0,183	0,223	0,249	0,261	0,269	0,254	0,241

Tabela 5.16 - A eficiência exergetica de cada processo em função do coeficiente de ar teórico. Motor a gasolina.

alfa	0,6505	0,7806	0,8456	0,9107	0,9757	1,1058	1,1708
ϵ_{CP}	0,998	0,996	0,995	0,994	0,993	0,992	0,992
ϵ_{CB}	0,380	0,454	0,494	0,543	0,608	0,630	0,626
ϵ_{EX}	0,843	0,828	0,823	0,818	0,816	0,820	0,823
ϵ_{FE}	0,475	0,495	0,505	0,519	0,540	0,536	0,530
ϵ_{ES}	0,937	0,938	0,939	0,939	0,939	0,934	0,931
ϵ_{AD}	0,636	0,643	0,646	0,647	0,649	0,651	0,650
ϵ_{AB}	0,668	0,666	0,664	0,661	0,659	0,658	0,657
ϵ_o	0,118	0,155	0,176	0,200	0,233	0,231	0,220

pouca transmissão de calor. Por toda a faixa coberta pelos dois casos, porém, a eficiência exergetica deste processo é maior para a versão a gasolina, que tem menor taxa de compressão.

A eficiência exergetica do processo de combustão (ϵ_{co}) nos dois casos passa por um máximo; para o motor a álcool, este máximo ainda ocorre na região de mistura rica, enquanto para a gasolina, na de mistura pobre. É evidente da comparação entre as duas tabelas que as maiores pressões e temperaturas atingidas pelo motor a álcool se traduzem em maiores eficiências de combustão.

No caso das eficiências exergeticas do processo de expansão, verifica-se valores menores do que na compressão, dado que o processo de transmissão de calor neste caso é muito mais forte, devido às diferenças de temperatura mais elevadas.

Para a fase fechada do ciclo tomada de forma conjunta, verifica-se que o motor a álcool possui maiores eficiências de fase fechada (ϵ_{FE}), mas a diferença entre os dois casos não é tão marcante como no processo de combustão.

A eficiência do processo de escape (ϵ_{ES}) cai sempre no caso da versão a álcool quando o coeficiente de ar teórico aumenta, enquanto que passa por um máximo para a gasolina. A de

admissão (ϵ_{AD}), por outro lado, diminui sempre nos dois casos.

É interessante observar que a eficiência exergética para a fase aberta do ciclo (ϵ_{AB}) diminui nos dois casos, embora proporcionalmente mais no caso do motor a álcool.

A eficiência exergética global é diferente das demais por relacionar a potência de eixo com a exergia recebida por unidade de tempo. É a eficiência exergética que corresponde ao conceito de rendimento térmico efetivo e não, como as anteriores, a condições de dentro do cilindro (ou indicadas). Ela considera também a irreversibilidade do atrito, estimado segundo os critérios da Norma ABNT 5477.

O balanço global energético, também em função do coeficiente de ar teórico, é mostrado nas Tabelas 5.17 e 5.18, para os motores a álcool e a gasolina, respectivamente. Nessas tabelas, a energia que entra no cilindro por ciclo (En_E) foi obtida a partir da massa de combustível e de seu poder calorífico inferior (PCI). O trabalho indicado líquido (WL), o calor líquido re-

Tabela 5.17 - O balanço global energético em função do coeficiente de ar teórico. Motor a álcool.

Alfa	En_E	WL	QL	En_s	Pmi
0,7566	1.	0,2783	0,1558	0,5658	8,139
0,8148	1.	0,3040	0,1737	0,5224	8,317
0,8730	1.	0,3319	0,1907	0,4775	8,527
0,9412	1.	0,3651	0,2055	0,4293	8,845
0,9842	1.	0,4048	0,2172	0,3780	9,273
1,0768	1.	0,4006	0,2239	0,3755	8,490
1,1059	1.	0,3980	0,2252	0,3769	8,215
1,1640	1.	0,3944	0,2265	0,3791	7,754
1,2223	1.	0,3921	0,2271	0,3808	7,367
1,2688	1.	0,3906	0,2276	0,3818	7,077

Tabela 5.18 - O balanço energético global em função do coeficiente de ar teórico. Motor a gasolina.

Alfa	En_E	WL	QL	En_S	Pmi
0,6505	1.	0,1981	0,1062	0,6951	6,776
0,7806	1.	0,2508	0,1454	0,5951	7,220
0,8456	1.	0,2790	0,1646	0,5584	7,441
0,9107	1.	0,3114	0,1825	0,5062	7,727
0,9757	1.	0,3522	0,1969	0,4509	8,181
1,0408	1.	0,3717	0,2068	0,4215	8,109
1,1058	1.	0,3643	0,2094	0,4263	7,489
1,1708	1.	0,3593	0,2108	0,4297	6,971

jeitado (QL) e a energia que sai com os gases de escape (En_S) são apresentados em termos de percentagem da energia fornecida ao motor.

O trabalho líquido como um percentual da energia fornecida ao motor é, por definição, o rendimento térmico indicado. Nas Figuras 5.14 e 5.15 é mostrado o rendimento térmico indicado correspondente a estas tabelas.

O calor líquido rejeitado pelo ciclo aumenta proporcionalmente quando o coeficiente de ar teórico se torna maior, para os dois combustíveis. O rápido aumento na região de mistura rica é devido a um aumento razoável nas temperaturas do ciclo ao se aumentar o coeficiente de ar teórico.

Para as duas versões a energia que sai com os gases de escape passa por um mínimo. A redução na energia que sai do cilindro com o aumento do coeficiente de ar teórico é muito rápida na região de mistura rica, devido à redução na quantidade de gases combustíveis (principalmente o monóxido de carbono). O aumento que ocorre na região de mistura pobre é bem mais lento. Como o motor a álcool apresenta uma maior eficiência e uma rejeição de calor apenas levemente maior do que a versão a gasolina, a energia perdida nos gases de escape é sempre menor para a versão

a álcool, quando comparados na mesma faixa de coeficiente de ar teórico.

Os balanços globais de exergia estão indicados nas Tabelas 5.19 e 5.20, para os mesmos casos apresentados para o balanço de energia. De forma análoga, as grandezas estão apresentadas de forma percentual em relação à exergia que é fornecida ao cilindro em cada caso.

O trabalho líquido percentual pode ser entendido como a eficiência exergética global indicada e pode ser comparado com a eficiência exergética global efetiva apresentada nas Tabelas 5.15 e 5.16. Os valores do trabalho líquido percentual são menores do que os correspondentes rendimentos térmicos indicados das Tabelas 5.17 e 5.18 pois a exergia fornecida ao cilindro é maior do que a energia baseada no poder calorífico inferior. Os valores do trabalho líquido para a versão a álcool são sempre maiores do que os da versão a gasolina quando comparados na mesma faixa do coeficiente de ar teórico - o que mais uma vez constata a maior eficiência da versão a álcool.

Tabela 5.19 - O balanço exergético global em função do coeficiente de ar teórico. Motor a álcool.

Alfa	Ex_E	WL	Ex_a	Ex_s	Dest.
0,7566	1.	0,2619	0,0626	0,4286	0,2470
0,8148	1.	0,2864	0,0698	0,3846	0,2592
0,8730	1.	0,3130	0,0767	0,3399	0,2703
0,9412	1.	0,3448	0,0828	0,2932	0,2792
0,9842	1.	0,3627	0,0876	0,2447	0,2849
1,0768	1.	0,3790	0,0904	0,2356	0,2951
1,1059	1.	0,3764	0,0909	0,2348	0,2979
1,1640	1.	0,3731	0,0914	0,2326	0,3026
1,2223	1.	0,3711	0,0917	0,2307	0,3066
1,2666	1.	0,3697	0,0919	0,2288	0,3095

Tabela 5.20 - O balanço exergetico global em função do coeficiente de ar teórico. Motor a gasolina.

Alfa	Ex_E	W_L	Ex_Q	Ex_S	Dest.
0,6505	1.	0,1859	0,0425	0,5483	0,2233
0,7806	1.	0,2362	0,0584	0,4526	0,2528
0,8456	1.	0,2632	0,0663	0,4041	0,2665
0,9107	1.	0,2941	0,0736	0,3538	0,2785
0,9757	1.	0,3332	0,0795	0,3002	0,2870
1,0408	1.	0,3520	0,0836	0,2693	0,2951
1,1058	1.	0,3451	0,0846	0,2678	0,3025
1,1708	1.	0,3405	0,0852	0,2657	0,3086

Embora a exergia associada à transmissão de calor obedeça às mesmas tendências já descritas na análise de primeira lei para o calor líquido, os valores são substancialmente menores.

A exergia que sai com os gases de escape é sempre decrescente com o aumento no coeficiente de ar teórico, para os dois motores. Da mesma forma que para a energia perdida nos gases de escape, a redução é muito rápida na região de mistura rica e é consideravelmente lenta na região de mistura pobre: também aqui a existência de gases combustíveis na região de mistura rica faz com que a exergia perdida seja grande.

Ao contrário da análise energética, o balanço exergetico se fecha com um termo de destruição: a irreversibilidade. A destruição de exergia é sempre crescente com o aumento no coeficiente de ar teórico, para os dois motores. Esse aumento na irreversibilidade não pode ser entendido como pernicioso a menos que se pretenda empregar todo o potencial exergetico do motor (exergia associada à transmissão de calor e dos gases de escape) e não apenas o trabalho de eixo. É interessante notar que a destruição de exergia é aproximadamente igual para os dois combustíveis para a mesma faixa de coeficiente de ar teórico.

Os valores percentuais das Tabelas 5.16 a 5.20 podem ser

comparados às análises encontradas na literatura. Apesar de se referir a motores diesel turboalimentados - e tomando em conta os maiores valores de eficiência energética e exergética desse tipo de motor - os valores de análise de primeira e segunda leis da termodinâmica apresentados na referência [31] são comparáveis e coerentes com os obtidos neste trabalho. Da mesma forma, algumas das conclusões apresentadas no trabalho de Alkidas [30] se confirmaram neste trabalho: ele cita que apenas cerca de 50 % da energia presente nos gases de escape pode ser empregada de forma útil - ou seja, a exergia dos gases de escape é cerca de 50 % de sua energia. Além disso, para a exergia do fluxo de calor, ele obteve de 10 % a 30 % quando a carga cai. Os valores das Tabelas 5.19 e 5.20 correspondem a uma carga próxima da máxima, os valores estão na faixa de 6 a 9 % e se referem a motores de ignição por centelha.

O único estudo que não se refere a motores diesel é o de Lior e Rudy [21]. Eles trabalharam com o ciclo Otto (a combustão substituída por um processo a volume constante) com uma mistura ar-combustível. Ao contrário deste trabalho, as condições iniciais foram consideradas constantes e a simulação não incluiu a fase aberta do ciclo. O efeito do coeficiente de ar teórico lá apresentado sobre o rendimento térmico indicado mostra uma tendência de crescimento monotônica com o empobrecimento da mistura. Para a eficiência exergética, porém, eles também obtiveram uma queda sutil para a região de mistura pobre, tal como a mostrada nas Figuras 5.14 e 5.15 e nas tabelas 5.19 e 5.20.

A fim de avaliar se a menor irreversibilidade na combustão apresentada pelo motor a álcool se deve exclusivamente à maior taxa de compressão, o modelo foi empregado para um motor a álcool operando com uma taxa de compressão igual à do motor a gasolina, embora na prática este caso não seja realista. Assim, a diferença entre os dois motores reside apenas na relação ar combustível, embora os coeficientes de ar teórico para o motor a álcool e a gasolina sejam, respectivamente, de 0,9757 e 0,9842.

As figuras 5.40 e 5.41 mostram a irreversibilidade por grau e por unidade de massa de mistura, respectivamente, durante o processo de combustão para os dois motores. Na primeira figura se percebe que o motor a álcool ainda possui menor irreversibilidade

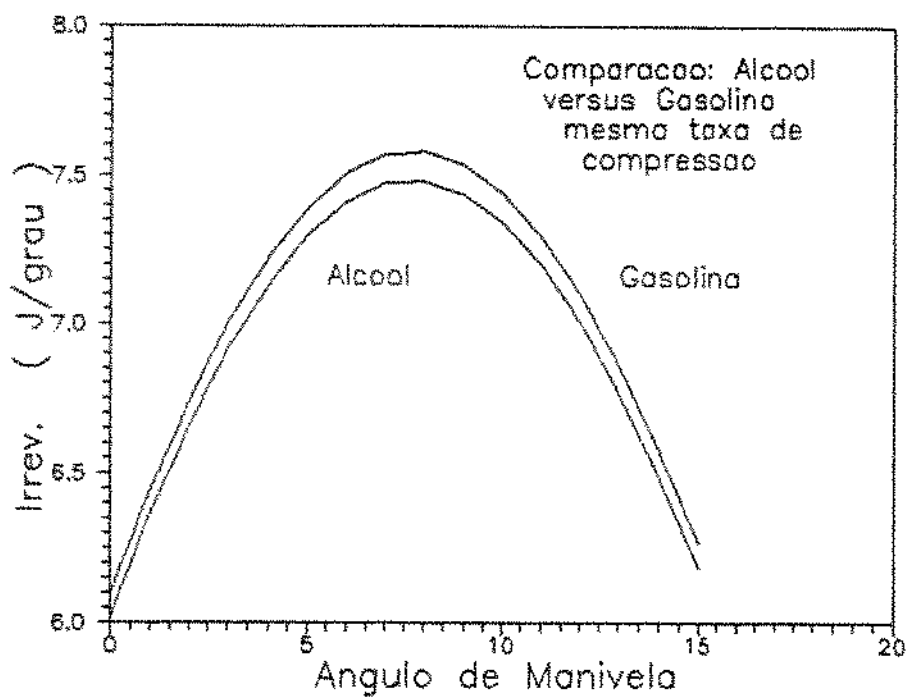


Figura 5.40 - Efeito do combustível sobre a irreversibilidade por grau na combustão.

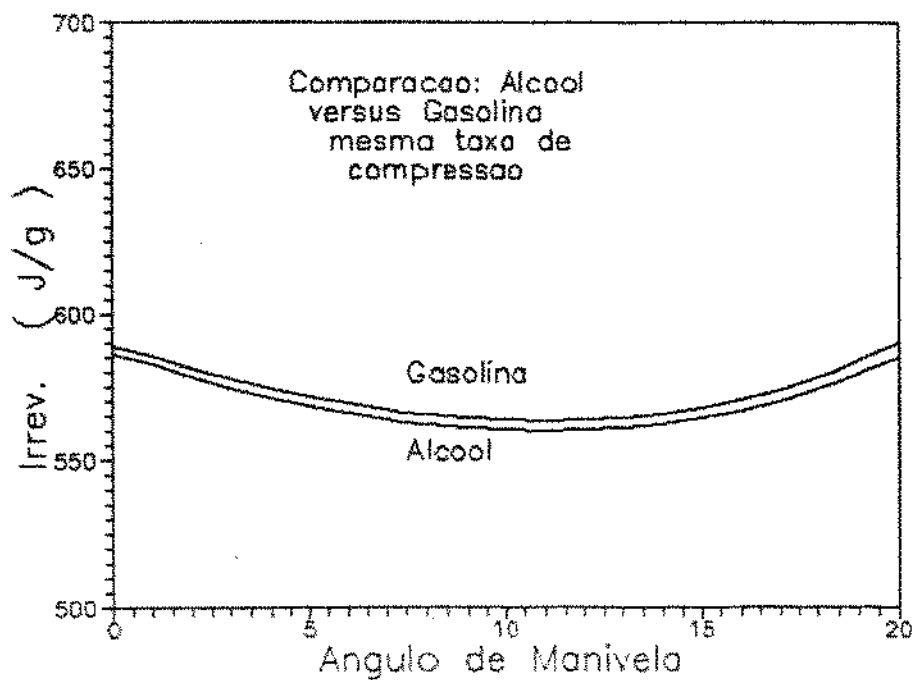


Figura 5.41 - Efeito do combustível sobre a irreversibilidade por unidade de massa na combustão.

do que o motor a gasolina. Também do ponto de vista da irreversibilidade por unidade de massa que queima, o motor a álcool apresentou uma menor destruição de exergia. A diferença entre os dois combustíveis porém, é muito mais sutil agora.

Uma comparação geral entre os motores a álcool normal, com taxa de compressão reduzida e a gasolina é apresentada na Tabela 5.21. Tanto a análise energética como a análise exergética são mostradas, bem como os valores em J/ciclo e em termos percentuais.

Do ponto de vista da análise energética já fica claro que o motor a álcool possui um melhor rendimento térmico, embora rejeite mais calor para as paredes. A energia dos gases de escape, portanto, é menor do que na versão a gasolina. O valor

Tabela 5.21 - Comparação entre as versões a álcool com taxas de compressão 12 e 8 e a versão a gasolina. Balanços globais energéticos e exergéticos.

	Álcool: taxa 12		Álcool: taxa 8		Gasolina: taxa 8	
	J/ciclo	%	J/ciclo	%	J/ciclo	%
1ª Lei						
En_E	915,39	1,0	904,40	1,0	928,18	1,0
W_L	370,57	0,4048	329,91	0,3648	326,92	0,3522
Q_L	198,82	0,2172	184,19	0,2037	182,75	0,1969
En_g	346,00	0,3780	390,30	0,4316	418,51	0,4509
2ª Lei						
Ex_E	968,25	1,0	956,82	1,0	981,09	1,0
W_L	370,57	0,3827	329,91	0,3446	326,92	0,3332
Ex_a	84,82	0,0876	78,58	0,0821	77,97	0,0795
Ex_g	236,97	0,2447	270,01	0,2822	294,65	0,3003
Dest.	276,19	0,2862	278,32	0,2909	281,55	0,2870

absoluto do trabalho líquido indica também que, além de maior rendimento térmico, também a pressão média efetiva é maior para a versão a álcool com taxa de compressão 8 em comparação com a versão a gasolina pois ambos tem as mesmas dimensões e a mesma taxa de compressão.

Também na Tabela 5.21 é apresentada uma análise exergetica global para os três motores. Todas as tendências já verificadas na análise energética se repetem. Porém, os valores da exergia associada à transmissão de calor são bem menores do que o calor líquido e o mesmo ocorre com a exergia que deixa o cilindro com os gases de escape em relação à energia equivalente. A irreversibilidade percentual do motor a álcool com taxa de compressão reduzida, todavia, é a maior de todas e reflete o fato de que este motor não está otimizado quanto à taxa de compressão.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

O desenvolvimento de motores com melhor desempenho, menor consumo de combustível e menores índices de poluição ambiental, por ser um processo de otimização multidimensional com várias restrições, requer um alto grau de conhecimento termodinâmico de cada processo e de como eles interagem. Como exemplos das restrições podem ser citadas as condições de partida a frio, de manutenção de marcha lenta, resposta em regime transitório, limitações de carga térmica e de carga estrutural, além de uma variedade de considerações acerca de configurações e de instalação que podem ser afetadas até por motivos de estética do veículo.

A análise exergética acoplada a modelos de simulação amplia o conhecimento acerca dos processos internos ao motor e mostra explicitamente as restrições devidas à Segunda Lei. O uso combinado da Primeira e Segunda Leis através do método aqui apresentado mostra não só como a energia se transforma no motor mas também identifica e quantifica as irreversibilidades associadas a reações químicas, transmissão de calor com diferenças finitas de temperatura, escoamentos com atrito e atritos mecânicos.

O modelo de simulação desenvolvido, apesar das limitações impostas pelas hipóteses assumidas, mostrou ser adequado. Todos os principais parâmetros que afetam o desempenho puderam ser estudados e os resultados obtidos apresentaram tendências coerentes.

Os resultados clássicos do efeito da taxa de compressão

puderam ser verificados, tais como mostrados nos diagramas indicadores e nos gráficos de evolução da pressão e temperatura com o ângulo de manivela, para as versões a álcool e a gasolina.

Aplicando-se passo a passo o balanço de exergia foi possível avaliar a irreversibilidade de cada processo. Os processos de compressão e expansão têm sua irreversibilidade devida apenas a transmissão de calor. No primeiro, devido às baixas temperaturas do fluido de trabalho, a irreversibilidade é menor. Na combustão a destruição de exergia é devida fundamentalmente a reações químicas, embora a transmissão de calor também contribua. Na fase aberta, a irreversibilidade dos processos de admissão e escape é determinada a partir da transmissão de calor e do escoamento com atrito dos gases através das válvulas. Além disso, a análise exergética demonstrou que a irreversibilidade durante a combustão é de uma a duas ordens de grandeza maior do que os demais processos e que ela é menor para o motor a álcool.

Os efeitos da rotação puderam ser verificados. Do ponto de vista do desempenho global do motor, quando a rotação aumenta, ocorre um ligeiro aumento no rendimento térmico indicado, devido a uma menor transmissão de calor. O rendimento mecânico diminui por conta do aumento do atrito e por isso o rendimento térmico efetivo também é decrescente. Para o rendimento volumétrico existe uma rotação para a qual se atinge um máximo. A forma como a rotação afeta as irreversibilidades internas para cada um dos processos (admissão, compressão, combustão, expansão e escape) pode ser verificada através de eficiências exergéticas que indicam não só o que ocorre em cada processo mas também como os processos se afetam mutuamente.

A análise exergética para a combustão permitiu que fossem comparadas diferentes características importantes, como o efeito do ponto de ignição, da duração da combustão e da forma da velocidade de queima não só do ponto de vista dos efeitos sobre a pressão máxima do ciclo como também das implicações daquelas variáveis sobre a irreversibilidade. Uma vez que neste trabalho se determinam duas regiões durante a combustão - a de mistura não queimada e a de produtos de combustão, foi possível mostrar que a destruição de exergia na combustão é fortemente dependente da

temperatura em que se dá a reação. Em outros trabalhos acerca de motores diesel, a única temperatura identificada era a temperatura média termodinâmica mas mesmo assim esses autores puderam constatar a dependência da irreversibilidade com a temperatura, com as mesmas tendências.

Outra evidência da dependência da irreversibilidade na combustão com a temperatura de queima surgiu da análise do efeito do coeficiente de ar teórico sobre a irreversibilidade por unidade de massa que queima: ao empobrecer a mistura, aumenta a irreversibilidade e a temperatura de queima diminui devido a menores pressões e temperaturas durante a combustão.

Comparando os valores da irreversibilidade por unidade de massa que queima deste trabalho com os valores obtidos por Velasquez e Milanez [188] e por Alkidas [30], pode-se concluir que, embora de mesma ordem de grandeza, a irreversibilidade por unidade de massa no caso dos motores de ignição por centelha é sempre menor do que para os motores de ignição por compressão. Os valores máximos para os motores a gasolina ou a álcool são um pouco menores ou aproximadamente iguais aos valores mínimos para os motores diesel, dependendo das condições de operação de cada um deles.

A variação do sincronismo do mecanismo de válvulas através dos pontos de abertura da válvula de escape, abertura da válvula de admissão, fechamento da de escape e da de admissão conduziu a tendências que concordam com as apresentadas pela literatura. O cruzamento de válvulas também foi estudado e pode-se afirmar, pelos resultados obtidos, que um grande cruzamento de válvulas como o admitido para o caso base apresenta maior interesse apenas quando a pressão de escape é maior do que a de admissão (motor sobrealimentado) ou em decorrência de efeitos dinâmicos (que não foram considerados neste trabalho). Ficou patente que seria possível otimizar o desempenho da fase aberta com um menor cruzamento de válvulas.

Os efeitos da pressão dos coletores de escape e de admissão são bastante claros e possuem as mesmas características, independente da rotação do motor: quanto mais próximas forem essas pressões da pressão ambiente, melhor o desempenho do motor. Para

os motores de ignição por centelha, porém, a carga é controlada pela restrição ao fluxo de mistura pelo cilindro, o que gera uma grande depressão no coletor de admissão. Além de reduzir a potência do motor, o estrangulamento no fluxo de admissão deteriora o desempenho do motor com relação a todos os indicadores: rendimento volumétrico, rendimento térmico indicado, rendimento térmico e eficiências exergéticas.

A irreversibilidade por grau de ângulo de manivela durante a fase aberta demonstrou ser uma importante informação que pode ajudar na escolha de um novo comando de válvulas, à medida que indica, em cada região, valores comparativos da destruição de exergia para os diferentes sincronismos. Da mesma maneira, as eficiências exergéticas de escape, admissão e da fase fechada podem ser bastante úteis para se avaliar como cada processo interfere e influencia o outro. Uma maior eficiência exergética no escape, por exemplo, não necessariamente conduz a um melhor desempenho: essa melhora do processo de escape pode influenciar negativamente o de admissão e o resultado global para a fase aberta ser pior.

Para avaliar a pressão média indicada, nem sempre o rendimento volumétrico é suficiente. É importante registrar que o melhor indicador neste caso é a eficiência exergética da fase aberta: quanto maior seu valor, maior a pressão média indicada.

A comparação entre os casos base demonstrou que o motor a álcool possui melhor desempenho do que a versão a gasolina, sob qualquer critério (rendimentos térmicos indicado e efetivo, eficiências exergéticas global ou indicada, pressão média efetiva).

A análise exergética mostra que a eficiência de combustão no motor a álcool é maior do que na versão a gasolina, quando comparados numa mesma faixa de coeficiente de ar teórico para a combustão.

A fim de verificar se o melhor desempenho da versão a álcool devia-se exclusivamente ao emprego de uma taxa de compressão bastante mais elevada, foi simulada a operação de um outro motor a álcool com as mesmas características que o caso base mas com a taxa de compressão igual à da versão a gasolina. Os resultados

mostraram que, mesmo com a mesma taxa, o motor a álcool possui melhor desempenho. As eficiências exergeticas são maiores do que as da gasolina e a irreversibilidade por unidade de massa que queima continua sendo menor. Isto mostra que o álcool possui uma combustão menos irreversível do que a gasolina.

A inexistência de conjuntos de dados experimentais motivou o presente estudo paramétrico. Todavia, o emprego futuro do método de simulação aqui desenvolvido deverá ser efetuado com base em diagramas indicadores medidos em bancada.

Outros resultados poderiam ser analisados com pequenas mudanças no programa simulador: a influência de diferentes perfis de cames para o motor, a influência da turboalimentação, outros modelos para a evolução da combustão (como o modelo de velocidade de chama) e a utilização de pressões instantâneas variáveis medidas ou estimadas por cálculo nos coletores de admissão.

Uma perspectiva natural de evolução deste trabalho aponta para a possibilidade de se abandonar a hipótese de equilíbrio químico e, através de equações de cinética química, tentar prever a formação de óxidos de nitrogênio.

Modelos mais avançados para a combustão - como o modelo de avanço turbulento - poderão também ser testados de forma conjunta com uma melhor definição geométrica da câmara de combustão e com novos modelos de transmissão de calor instantânea baseados em conceitos de camada limite em desenvolvimento. Esse grau de detalhamento servirá para previsão de emissões de monóxido de carbono e outros poluentes.

Este trabalho procurou mostrar que a análise tradicional de motores baseada apenas na Primeira Lei pode não ser suficiente para indicar caminhos e tendências que busquem melhorar o desempenho. Os balanços globais exergeticos, a determinação de eficiências exergeticas e de como se distribuem ao longo de cada processo as irreversibilidades são poderosas ferramentas para descobrir onde há reais possibilidades de aproveitamento de perdas ou de ganhos em processos.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] BORMAN, G. Reciprocating Engines Combustion Research Needs. SAE Trans. 850398, 1985, p.101-112.
- [2] LAVOIE, G. A. ; HEYWOOD, J. B. ; KECK, J. C. Experimental and Theoretical Study of Nitric Oxide Formation in Internal Combustion Engines. Combustion Sci. and Tech. 1:313-326, 1970.
- [3] HASKELL, W. W. & LEGATE, C. E. Exhaust Hydrocarbon Emissions from Gasoline Engines - Surface Phenomena. SAE Paper 720255, 1972, p.1-13.
- [4] DANESHYAR, H. & WATFA, M. Predicting Nitric Oxide and Carbon Monoxide Concentrations in Spark Ignition Engines. Proc. Instn. Mech. Engrs. 188:437-455, 1974.
- [5] PATTERSON, D. J. & HENEIN, N. A. *Emissions from Combustion Engines and Their Control.* Ann Arbor, Ann Arbor Science Publishers, 1972.
- [6] LoRUSSO, J. A. ; KAISER, E. W. ; LAVOIE, G. A. Quench Layer Contributions to Exhaust Hydrocarbons from a Spark Ignition Engine. Combustion Sci. and Tech. 25:121-125, 1981.
- [7] HEYWOOD, J. B. Pollutant Formation and Control in Spark Ignition Engines. Prog. Energy Combustion Sci 1:135-164, 1976.
- [8] KUMMER, J. T. Catalysts for Automobile Emission Control. Prog. Energy Combustion Sci. 6:177-199, 1980.
- [9] BRINKMAN, N. D. Ethanol Fuel - A Single - Cylinder Engine Study of Efficiency and Exhaust Emissions. SAE Trans. 810345, 1981, p.1410-1424.
- [10] WAGNER, T. O. Future Fuels for Future Engines. SAE Trans. 811387, 1981, p.4167-4174.
- [11] KUKKONEN, C. A. Hydrogen as an Alternative Automobile Fuel. SAE Trans. 810349, 1981, p.1425-1461.

- [12] FUJISAWA, T. & YOKOTA, K. A New Look at the Utilization of Alternative Fuels for Diesel Engines. SAE Trans. 810998, 1981, p. 3128-3134.
- [13] VELLGUTH, G. Performance of Vegetable Oils and Their Mono-Esters as Fuels for Diesel Engines. SAE Trans. 831358, 1983, p. 3.1098-3.1107.
- [14] D'ELIA, J.; AZEVEDO, M. N. D.; MAHRUS, D. Ignition Timing Influence upon Piston Performance of Ethanol-fueled Otto Cycle Engines. Anais do IV Simposio Internacional sobre Tecnologia dos Alcoois como Combustiveis. Guarujá, Brasil 5-8 out. 1980, p. 341-346.
- [15] SCHMIDT, Ph.; CZASCHKE, H. W.; RANGEL, G. N.; PINTO, N. L. M. Desenvolvimento de Veiculos e Motores a Alcool pela Volkswagen do Brasil S. A. Anais do IV Simposio Internacional sobre Tecnologia dos Alcoois como Combustiveis. Guarujá, Brasil 5-8 out. 1980, p. 373-378.
- [16] DANIELI, G. A.; FERGUSON, C. R.; HEYWOOD, J. B.; KECK, J. C. Predicting the Emissions and Performance Characteristics of a Wankel Engine. SAE Trans. 740186, 1974, p. 805-820.
- [17] YAMAMOTO, K. Rotary Engine. Tokyo, Sankaido Co. Ltd, 1981.
- [18] AMANN, C. A. An Introduction to the Vehicular Gas Turbine Engine. SAE Trans. 730618, 1973, p. 2197-2215.
- [19] COLLMAN, J. S.; AMANN, C. A.; MATTHEW, C. C.; STETTLER, R. J.; VERKAMP, F. J. The GT-225 - An Engine for Passenger-Car Gas-Turbine Research. SAE Trans. 750167, 1975, p. 690-712.
- [20] BEANS, E. W. A Mathematical Model for the Stirling Engine ASME Trans. J. Eng. Power 103(3):505-510, July 1981.
- [21] COMBUSTION SCIENCE AND TECHNOLOGY Stratified Charge Engines (Special Issue) 8(1-2), 1973.
- [22] COMBUSTION SCIENCE AND TECHNOLOGY Stratified Charge Engines (Special Issue) 12(1-3), 1976.
- [23] PATTERSON, D. J. A Comprehensive Cycle Analysis and Digital Computer Simulation for Spark - Ignited Engines. PhD. Thesis, University of Michigan, 1962.
- [24] LIOR, N. & RUDY, G. J. Second-Law Analysis of an Ideal Otto Cycle. Second-Law Analysis of Heat Transfer in Energy Systems, ASME HTD 80:39-47, 1987.
- [25] PRIMUS, R. J.; HOAG, K. L.; FLYNN, P. F.; BRANDS, M. C. An Appraisal of Advanced Engine Concepts Using Second Law Analysis Techniques. SAE Paper 841287, 1984, p. 73-87.
- [26] FLYNN, P. F.; HOAG, K. L.; KAMEL, M. M.; PRIMUS, R. J. A New Perspective on Diesel Engine Evaluation Based on Second Law Analysis. SAE Paper 840032, 1984, p. 1-14.

- [27] PRIMUS, R. J. & FLYNN, P. F. The Assessment of Losses in Diesel Engines Using Second Law Analysis. Computer-Aided Engrng. of Energy Systems. ASME AES V-2, 1987, p.61-68.
- [28] PRIMUS, R. J. A Second Law Approach to Exhaust System Optimization. SAE Paper 840033, 1984, p.1-13.
- [29] VANGERPEN, J. H. & SHAPIRO, H. N. Second Law Analysis of Diesel Engine Combustion. Analysis and Design of Advanced Energy Systems: Computer-Aided Analysis and Design. ASME AES V-3-3, 1987, p.53-65.
- [30] ALKIDAS, A. C. The Application of Availability and Energy Balances to a Diesel Engine. Trans. ASME, 110:452-459, July, 1988.
- [31] KUMAR, S. V.; MINKOWICZ, W. J.; PATEL, K. S. Thermodynamic Cycle Simulation of the Diesel Cycle: Exergy as a Second - Law Analysis Parameter. Int. Comm. Heat Mass Transfer 16:335-346, 1989.
- [32] TOWNSEND, D. W. Second Law Analysis in Practice. The Chemical Engineer, Oct. 1980, p.268-633.
- [33] KOTAS, T. J. Exergy Concepts for Thermal Plant. Int. J. Heat & Fluid Flow, 2(3):105-114, 1980.
- [34] KOTAS, T. J. Exergy Criteria of Performance for Thermal Plant Int. J. Heat & Fluid Flow, 2(4):147-163, 1980.
- [35] KOTAS, T. J. The Exergy Method of Thermal Plant Analysis. London, Butterworths, 1985.
- [36] BOUCHET, E. Analyse Énergétique des Centrales Thermiques et Nucléaires à Vapeur et à Gaz. Rev. Gen. Therm. (152/153) :623-636, Août-Sept. 1974.
- [37] HORLOCK, J. H. The Rational Efficiency of Power Plants with External Combustion. Proc. Instn. Mech. Engrs. 178 (part 31) :43-63, 1963/1964.
- [38] SCIUBBA, E.; KELNHOFER, W. J.; ESMAILI, H. Second Law Analysis of a Combined Gas Turbine - Steam Turbine Cycle Power Plant. Trans. ASME HTD 32:55-68, 1984.
- [39] BRZUSTOWSKI, T. A. Toward a Second Law Taxonomy of Combustion Processes. Energy 5(8-9):743-755, 1980.
- [40] BERETTA, G. P. & KECK, J. C. Energy and Entropy Balances in a Combustion Chamber: Analytical Solution. Comb. Sci. Tech. 30:19-29, 1983.
- [41] BEDRAN, E. C. & BERETTA, G. P. General Thermodynamics Analysis for Engine Combustion Modelling. SAE Paper 850205, 1985 p.1-11.

- [42] TRIBUS, M. ; EVANS, R. B. ; CRELLIN, G. L. Thermoeconomic Demineralization. In: SPIEGLER, K. W. *Principles of Desalination*. New York, Academic Press, 1966.
- [43] BRODYANSKII, V. M. Thermodynamic Analysis of Gas-Liquefaction Processes - Part I: Basic Methods of Analysis. Inzhenerno-Fizicheskii Zhurnal 6(7), July 1963. (Transl. to english).
- [44] BRODYANSKII, V. M. Thermodynamic Analysis of Gas-Liquefaction Processes - Part II: Analysis of Air Liquefaction by Linde Process. Inzhenerno Fisicheskii Zhurnal 6(10), oct. 1963. (transl. to english).
- [45] MELSTER, L. H. Method of Thermodynamic Evaluation of Theoretical and Actual Cycles of Cooling Machines. Kholodilnaya Tekhnika i Tekhnologiya, 6, 1968. Kiev. (transl. to English).
- [46] MARTYNOVSKII, V. S. & SCHNAID, I. M. Thermodynamic Analysis of Reverse Lorentz Cycle. Kholodilnaya Tekhnika i Tekhnologiya 3, 1966, Kiev. (transl. to English).
- [47] MARTYNOVSKII, V. S. ; MELSTER, L. H. ; NAER, V. A. ; BODNARENKO, L. F. Combined Production of Heat and Refrigeration Using an Air-Cooling Machine. Kholodilnaya Tekhnika 12, Dec. 1970 (translated to English).
- [48] MARTYNOVSKII, V. S. ; CHEILYAKH, V. T. ; SCHNAID, T. N. Thermodynamic Effectiveness of a Cooled Shield in Vacuum Low - Temperature Insulation. Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Energitika i Transport, 2, 1971. (translated to English).
- [49] BRODYANSKII, V. M. Combined Processes in Cooling Technology and the Second Law of Thermodynamics. Kholodilnaya Tekhnika 8, aug. 1971. (translated to English).
- [50] BEJAN, A. Second Law Analysis in Heat Transfer and Thermal Design. Advances in Heat Transfer 15:1-58, 1982.
- [51] BEJAN, A. Thermodynamics of Heat Transfer Devices. Second Law Analysis of Thermal Systems, 4th Int. Symposium on Second Law Analysis of Thermal Systems, ASME, 1987, p.1-14.
- [52] WITTE, L. C. The Influence of Availability Costs on Optimal Heat Exchanger Design. J. Heat Transfer 110:830-835, 1988.
- [53] EL-SAYED, Y. M. & EVANS, R. B. Thermoeconomics and the Design of Heat Systems. Trans. ASME, J. Engng. Power, Jan. 1970, p. 27-35.
- [54] GAGGIOLI, R. A. , & WEPFER, W. J. Exergy Economics. Energy 5(8-9):823-838, 1980.

- [55] REISTAD, G. M. & GAGGIOLI, R. A. Available - Energy Costing. In: GAGGIOLI, R. A. *Thermodynamics: Second Law Analysis*, Washington, American Chemical Society, 1980, p.143-160
- [56] RANT, Z. Exergy, ein neues Wort für technische Arbeitsfähigkeit. Forsch. Ing. Wes. 22, 1956.
- [57] GAGGIOLI, R. A. The Concept of Available Energy. Chem. Engng. Sci. 16:87-96, 1961.
- [58] GAGGIOLI, R. A. The Concepts of Thermodynamic Friction, Thermal Available Energy, Chemical Available Energy and Thermal Energy. Chem. Engng. Sci. 17:523-530, 1962.
- [59] EVANS, R. B. A Proof that Essergy is the only Consistent Measure of Potential Work (for work systems). PhD Thesis, Dartmouth College, 1969.
- [60] REISTAD, G. K. Availability: Concepts and Applications. PhD Thesis, University of Wisconsin, 1970.
- [61] HAYWOOD, R. W. A Critical Review of the Theorems of Thermodynamic Availability, with Concise Formulations. Part I. J. Mech. Eng. Sci. 16(3):160-173, 1974.
- [62] HAYWOOD, R. W. A Critical Review of the Theorems of Thermodynamic Availability, with Concise Formulations. Part II. J. Mech. Eng. Sci. 16(4):258-267, 1974.
- [63] BIDARD, R. Exergie, Rendements de Cycles, Rendements de Machines. Rev. Gen. Therm. (150-151):481-488, Juin-Juillet, 1974.
- [64] BOREL, L. Théorie Générale de l'Exergie et Applications Pratiques: Rendement Exergétique. Entropie (87):4-16, 1979.
- [65] VIVARELLI, R.; SCIUBBA, E.; GUIZZI, G. L. " Sull'Impiego della Grandezza Exergia nell'Analisi di Trasformazioni Termodinamiche. La Termotecnica 30(9):473-481, 1976.
- [66] MORAN, M. Availability: A Guide to Efficient Energy Use. Englewood Cliffs, Prentice - Hall, 1982.
- [67] AHERN, J. E. The Exergy Method of Energy Systems Analysis. New York, John Wiley & Sons, 1980.
- [68] GAGGIOLI, R. A. (Editor) *Thermodynamics: Second Law Analysis*. Washington, American Chemical Society, 1980.
- [69] GAGGIOLI, R. A. (Editor) *Efficiency and Costing: Second Law Analysis of Processes*. Washington, American Chemical Society, 1983.
- [70] ENERGY Second Law Analysis of Energy Devices and Processes (Special Issue) 5(8-9), 1980.

- [71] SZARGUT, J. International Progress in Second Law Analysis. Energy 5(8-9):709-718, 1980.
- [72] GAGGIOLI, R. A. Principles of Thermodynamics. In: Thermodynamics: Second Law Analysis. Washington, American Chemical Society, 1980, p.3-13.
- [73] GAGGIOLI, R. A. Second Law Analysis for Processes and Energy Engineering. In: Efficiency and Costing: Second Law Analysis of Processes. Washington, American Chemical Society, 1980, p.3-50.
- [74] MODELL, M. & REID, R. C. *Thermodynamics and its Applications*. 2. ed., Englewood Cliffs, Prentice - Hall International Series, 1983.
- [75] KESTIN, J. *A Course in Thermodynamics*. New York, McGraw-Hill, 1979.
- [76] ROSEN, M. A. & SCOTT, D. S. On the Sensitivities of Energy and Exergy Analysis to Variations in Dead - State Properties. Analysis and Design of Advanced Energy Systems: Fundamentals, ASME AES Vol.3-1, 1987, p.23-32.
- [77] DENBIGH, K. *The Principles of Chemical Equilibrium*. 2. ed., London, Cambridge University Press, 1966.
- [78] KEENAN, J. H. Availability and Irreversibility in Thermodynamics. Br. J. Appl. Phys. 2(183), 1951.
- [79] OBERT, E. F. *Thermodynamics* New York, Mc.Graw Hill, 1948.
- [80] WEPFER, W. J. & GAGGIOLI, R. A. Reference Datum for Available Energy. In: Thermodynamics: Second Law Analysis. Washington, American Chemical Society, 1980, p.77-92.
- [81] GAGGIOLI, R. A. & PETIT, P. J. Use the Second Law, First. Chemtech. 7(8):496-506, 1977.
- [82] SUSSMAN, M. V. Steady - Flow Availability and the Standard Chemical Availability. Energy 5(8-9):793-802, 1980.
- [83] SZARGUT, J. & DZIEDZINIEWICZ, C. Energie Utilizable des Substances Chimiques Inorganiques. Entropie (40):14-23, Juillet - Août 1971.
- [84] MORRIS, D. R. & SZARGUT, J. Standard Chemical Exergy of Some Elements and Compounds on the Planet Earth. Energy 11(8):733-755, 1986.
- [85] AHRENDTS, J. Reference States. Energy 5(8-9):667-677, 1980.
- [86] KAMEYAMA, H.; YOSHIDA, K.; YAMAUCHI, S.; FUEKI, K. Evaluation of Reference Exergies for the Elements. Appl. Energy 11:69-83, 1982.

- [87] SZARGUT, J. & STYRYLSKA, T. Angenaherte Bestimmung der Exergie von Brennstoffen. Brennstoffen - Wärme - Kraft 16(12):589-596, 1964.
- [88] RODRIGUEZ, L. Calculation of Available-Energy Quantities. In: GAGGIOLI, R. A. Thermodynamics: Second Law Analysis. Washington, American Chemical Society, 1980, p.39-59.
- [89] GALLO, W. L. R. & MILANEZ, L. F. Choice of a Reference State for Exergetic Analysis. Energy 15(2):113-121, 1990.
- [90] HERSHEY, R. L.; EBERHARDT, J. E.; HOTTEL, H. C. Thermodynamic Properties of the Working Fluid in Internal Combustion Engines. SAE Trans. 1936, p.409-424.
- [91] NEWHALL, H. S. & STARKMAN, E. S. Thermodynamic Properties of Octane and Air for Engine Performance Calculations. SAE Paper 633 G, 1963, p.38-52.
- [92] VICKLAND, C. W., STRANGE, F. M., BELL, R. A.; STARKMAN, E. S. A Consideration of the High Temperature Thermodynamics of Internal Combustion Engines. SAE Progress in Technology 7:785-793, 1964.
- [93] SVEHLA, R. A. & McBRIDE, B. J. FORTAN IV Computer Program for Calculation of Thermodynamic and Transport Properties of Complex Chemical Systems. NASA Technical Report TN-D-7056 Lewis Research Center, 1973.
- [94] OLIKARA, C. & BORMAN, G. L. A Computer Program for Calculating Properties of Equilibrium Combustion Products with Some Applications to Internal Combustion Engines. SAE Paper 750468, 1975, p.1-21.
- [95] SPADACCINI, L. J. & CHINITZ, W. An Investigation of Non - Equilibrium Effects in a Internal Combustion Engine. ASME Trans. J. Engng. Power, April 1972, p.98-108.
- [96] ZACHARIAS, F. Analytical Representation of the Thermodynamic Properties of Combustion Gases. SAE Paper 670930, 1967, p.1-16.
- [97] BOUBLIK, T.; FRIED, V.; HALA, E. The Vapour Pressure of Pure Substances. Amsterdam, Elsevier, 1973.
- [98] ADVISORY GROUP FOR AEROSPACE RESEARCH AND DEVELOPMENT Properties of Air and Combustion Products with Kerosine and Hydrogen Fuels. British Siddeley Engines Ltd. 1967. Apud: WAY, R. J. B. Methods for Determination of Composition and Thermodynamic Properties of Combustion Products for Internal Combustion Engine Calculations. Proc. Instn. Mech. Engrs. 190:687-697, 1977.
- [99] STILL, D. R., & PROPHET, H. JANAF Thermochemical Tables. National Standard Reference Data System NSRDS-NBS-37, 2. ed., 1971.

- [100] REYNOLDS, W. C. *Thermodynamic Properties in SI.* Stanford, Stanford University Press, 1979.
- [101] REID, R. C. , FRAUSNITZ, J. M. ; SHERWOOD, T. K. *The Properties of Gases and Liquids.* 3. ed., New York, McGraw Hill, 1977.
- [102] BARIN, I. & KNACKE, O. *Thermodynamic Properties of Inorganic Substances.* Berlin, Springer - Verlag, 1973.
- [103] RAZNJEVIC, K. *Tables et Diagrammes Thermodynamiques.* Paris Editions Eyrolles, 1970.
- [104] IBELE, W. Thermophysical Properties. In: ROHSENOW, W. M. & HARTNETT. *Handbook of Heat Transfer.* New York, McGraw-Hill, 1973.
- [105] STULL, D. R. ; WESTRUM, E. F. ; SINKE, G. C. *The Chemical Thermodynamics of Organic Compounds.* Apud FERGUSON, C. R. *Internal Combustion Engines: Applied Thermosciences.* New York, John Wiley & Sons, 1986.
- [106] WAY, R. J. B. Methods for Determination of Composition and Thermodynamic Properties of Combustion Products for Internal Combustion Engine Calculations. Proc. Instn. Mech. Engrs. 190:687-697, 1977.
- [107] STRANGE, F. M. An Analysis of the Ideal Otto Cycle Including the Effects of Heat Transfer, Finite Combustion Rates, Chemical Dissociation and Mechanical Losses. SAE Progress in Technology 7:92-107, 1964.
- [108] McAULAY, K. I. ; WU, T. ; CHEN, S. K. ; BORMAN, G. L. , MYERS, P. S. ; UYEHARA, O. A. Development and Evaluation of the Compression Ignition Engine. SAE Paper 650451, 1965, p.1-30.
- [109] PHILLIPS, R. A. & ORMAN, P. L. Simulation of Combustion in a Gasoline Engine Using a Digital Computer. Advances in Automobile Engng. Part IV, Pergamon Press, 1966, p.93-145
- [110] BENSON, R. S. ; ANNAND, W. J. D. , BARUAH, P. C. A Simulation Model Including Intake and Exhaust Systems for a Single Cylinder Four-Stroke Cycle Spark-Ignition Engine. Int. J. Mech. Sci. 17:77-124, 1975.
- [111] BABU, M. K. G. & MURTHY, B. S. Simulation and Evaluation of a Four-Stroke Single Cylinder Spark-Ignition Engine. SAE Trans. 750687, 1976, p.1631-1659.
- [112] ASANUMA, T. ; BABU, M. K. G. ; YAGI, S. Simulation of Thermodynamic Cycle of Three-Valve Stratified Charge Engine. SAE Trans. 780319, 1978, p.1453-1468.
- [113] MATTAVI, J. N. The Attributes of Fast Burning Rates in Engines. SAE Trans. 800920, 1980, p.2783-2801.

- [114] POULOS, S. G. & HEYWOOD, J. B. The Effect of Chamber Geometry on Spark-Ignition Engine Combustion. SAE Trans. 830334, 1983, p.1.1106-1.1129.
- [115] BLUMBERG, P. N.; LAVOIE, G. A.; TABACZYNSKI, R. J. Phenomenological Models for Reciprocating Internal Combustion Engines. Prog. Energy Combustion Sci. 5:123-167, 1979.
- [116] RAMOS, J. I. Comparisons Between Thermodynamic and One-Dimensional Combustion Models of Spark-Ignition Engines. Appl. Math. Modelling. 10:409-422, Dec. 1986.
- [117] CARPENTER, M. H. & RAMOS, J. I. Mathematical Modelling of Spark-Ignition Engines. Appl. Math. Modelling 9:40-52, Feb. 1985.
- [118] GOSMAN, A. D. Flow Processes in Cylinders. In: HORLOCK, J. H. & WINTERBONE, D. E. (editors). *The Thermodynamics and Gas Dynamics of Internal Combustion Engines*. Oxford, Clarendon Press, 1986, p.616-772.
- [119] SUNG, N. W. & PATTERSON, D. J. Air Motion in a Two - Stroke Engine Cylinder - The Effects of Exhaust Geometry. SAE Paper 820751, 1982, p.1-11.
- [120] MYERS, P. The Art of Choosing a Model SAE Paper 850341, 1985, p.1-14.
- [121] BAUMEISTER, T. (Ed.) *Mark's Standard Handbook for Mechanical Engineers*. 8th. ed., New York, McGraw-Hill, 1978, p.2.12.
- [122] SHERMAN, R. H. & BLUMBERG, P. N. The Influence of Induction and Exhaust Processes on Emissions and Fuel Consumption in the Spark Ignited Engine. SAE Trans. 770880, 1977, p.3025-3040.
- [123] BORMAN, G. L. & NISHIWAKI, K. Internal Combustion Engine Heat Transfer. Prog. Energy Comb. Sci. 13:1-43, 1987.
- [124] JANEWAY, R. N. Quantitative Analysis of Heat Transfer in Engines. SAE Trans. 43(3):371-380, 1938.
- [125] OGURI, T. Theory of Heat Transfer in the Working Gases of Internal Combustion Engines. Bulletin JSME 3(11):370-377 1960.
- [126] COLE, R. M. & ALKIDAS, A. C. Inventory of Heat Losses for a Divided-Chamber Diesel Engine. SAE Trans. 821050, 1982, p.3307-3322.
- [127] YOSHIDA, M., HARIGAYA, Y. & SATO, K. Variation of Heat Flux Through a Combustion Chamber Wall of a Pre-Chamber Type Diesel Engine. Bulletin JSME 25(201):426-437, 1982.
- [128] WU, H. & KNAPP, R. A. A Heat Transfer Analysis of Automotive Internal Combustion Engines. Numerical Methods in Heat Transfer, 1981, p.511-527.

- [129] INOUE, S. & KOBAYASHI, K. Prediction of In-Cylinder Flow and Heat Transfer in Direct-Injection Diesel Engines. JSME Int. J. 30(264):950-957, 1987.
- [130] OVERBYE, V. D.; BENNETHUM, J. E.; UYEHARA, O. A.; MYERS, P. A. Unsteady Heat Transfer in Engines. SAE Trans. v. 69, 1961, p. 461-494.
- [131] NUSSELT, W. Der Wärmeübergang in der Verbrennungskraftmaschinen. Z. Verdt. Ing. v. 67, 1923, p. 692-708.
- [132] EICHELBERG, G. Some New Investigations on Old Combustion Engine Problems-II. Engineering 148:547-550, Nov. 1939.
- [133] ANNAND, W. J. D. Heat Transfer in the Cylinders of Reciprocating Internal Combustion Engines. Proc. Instn. Mech. Engrs. 177(36):973-990, 1963.
- [134] WOSCHNI, G. A Universally Applicable Equation for the Instantaneous Heat Transfer Coefficient in the Internal Combustion Engine. SAE Trans. 670931, 1967, p. 3065-3082.
- [135] SITKEI, G. & RAMANAIAH, G. V. A Rational Approach for Calculation of Heat Transfer in Diesel Engines. SAE Trans 720027, 1972, p. 165-174.
- [136] HOHENBERG, G. Advanced Approaches for Heat Transfer Calculations. SAE Trans. 790825, 1979, p. 2788-2806.
- [137] NISHIWAKI, K.; SHIMAMOTO, Y.; MIYAKE, K. Average Heat Transfer Coefficients on a Cylinder Wall in the Intake and Exhaust Processes of Motoring Test. Bull. JSME. 22(174): p. 1796-1809, 1979.
- [138] GALLO, W. L. R. Avaliação de Coeficientes de Película para Estudos de Transmissão de Calor Instantânea em Motores de Combustão Interna. Anais do II Encontro Nacional de Ciências Térmicas. Águas de Lindóia, 6 a 8 de dez. 1988, p. 57-60.
- [139] SVEHLA, R. A. Estimated Viscosities and Thermal Conductivities of Gases at High Temperatures. NASA Technical Report R-132. Lewis Research Center, 1962.
- [140] BENSON, R. S. & WHITEHOUSE, N. D. *Internal Combustion Engines.* 1. ed., London, Pergamon Press, 1979.
- [141] HAYWOOD, J. B.; TABACZYNSKI, R. J.; HIGGINS, J. M.; BRIGGS, M. A Modeling Study of the Fuel Consumption and NOx emission of Spark-Ignition Engines over a Range of Design and Operating Conditions. In: BLUMBERG, P. N. et alii Phenomenological Models for Reciprocating Internal Combustion Engines. Prog. Energy Comb. Sci. 5:123-167, 1979.
- [142] WOSCHNI, G. Engine Cycle Simulation, an Effective Tool for the Development of Medium Speed Diesel Engine. SAE Trans. 870570, 1987, p. 4.570-4.581.

- 143] KRIEGER, R. B. & BORMAN, G. The Computation of Apparent Heat Release for Internal Combustion Engines ASME Paper 66-WA/DGP-4, 1966, p.1-16.
- 144] STREIT, E. E. & BORMAN, G. L. Mathematical Simulation of a Large Turbocharged Two - Stroke Diesel Engine. SAE Trans. 710176, 1971, p. 733-768.
- 145] DOUAUD, A. Simulation des Phénomènes Internes au Cylindre d'un Moteur à Allumage par Compression. Entropie (45):17-30, mai-juin 1972.
- 146] WATSON, N. & KAMEL, M. Thermodynamic Efficiency Evaluation of an Indirect Injection Diesel Engine. SAE Trans. 790039, 1979, p.158-171.
- 147] SZEKELY JR, G. A. & ALKIDAS, A. C. A Two-Stage Heat-Release Model for Diesel Engines. SAE Trans. 861272, 1986, p.4.1117-4.1133.
- 148] ALKIDAS, A. C. Combustion Characteristics of a Single-Cylinder Open-Chamber Diesel Engine. ASME J. Eng. Gas Tur. Power. 109:419-425, oct. 1987.
- 149] LYN, W. T. Calculations of the Effect of the Rate of Heat Release on the Shape of Cylinder Pressure Diagram and Cycle Efficiency. Proc. Instn. Mech. Engrs. (A. D.) N.1, 1960-61, p. 34-46.
- 150] AUSTEN, E. W. & LYN, W. T. Relation Between Fuel Injection and Heat Release in a Direct Injection Engine and the Nature of the Combustion Process. Proc. Instn. Mech. Engrs. (A. D.) N.1, 1960-61, p. 47-62.
- 151] MIYAMOTO, N. et alli Description and Analysis of Diesel Engine Rate of Combustion and Performance using Wiebe's Function. SAE Paper 850107, 1985. In: SILVA, L. L. C. Simulação Termodinâmica do Ciclo de Trabalho de Motores Diesel. Anais do V Simpósio de Engenharia Automotiva São Paulo, 4 a 6 de setembro de 1989, p. 489-503.
- 152] WHITEHOUSE, N. D. & WAY, R. Rate of Heat Release in Diesel Engines and its Correlation with Fuel Injection Data Proc. Instn. Mech. Engrs. v.184, Pt3J, 1969/70, Paper 1.
- 153] SHROFF, H. D. & HODGETTS, D. Simulation and Optimization of Thermodynamic Processes of Diesel Engine. SAE Trans. 740194, 1974, p. 885-903.
- 154] CARAPANAYOTIS, A. & SALCUDEAN, M. Thermodynamic Simulation of a Two-Stroke Direct Injection Turbocharged Diesel Engine and Comparison with Experimental Measurements. Proc. of the ASME - JSME Thermal Engineering Joint Conference V-1, 1987, p. 209-216.

- [155] KUMAR, K. ; GAUR, R. R. ; GARG, R. D. ; BABU, M. K. G. A Thermo-dynamic Simulation Model for a Four-Stroke Medium Speed Diesel Engine. SAE Paper 840516, 1984, p.1-21.
- [156] MANSOURI, S. H. ; HAYWOOD, J. B. ; RADHAKRISHNAN, K. Divided Chamber Diesel Engine, Part I: A Cycle-Simulation which Predicts Performance and Emissions. SAE Trans. 820273 1982, p.1101-1132.
- [157] KORT, R. T. ; MANSOURI, S. H. ; HAYWOOD, J. B. , EKCHIAN, A. Divided Chamber Diesel Engine, Part II: Experimental Validation of a Predictive Cycle - Simulation and Heat Release Analysis. SAE Trans. 820274, 1982, p.1133-1147.
- [158] MOHAMMADZADEH, A. Stochastic Combustion Modelling of a Direct Injection Diesel Engine. PhD. Thesis, University of Michigan, 1984.
- [159] EDWARDS, J. B. & TEAGUE, D. M. Unravelling the Chemical Phenomena Ocurring in Spark Ignition Engines. SAE Trans. 700489, 1970, p.1742-1765.
- [160] BLAIR, G. P. Prediction of Two-Cycle Engine Performance Characteristics. SAE Trans. 760645, 1976, p.2017-2026.
- [161] FERGUSON, C. R. *Internal Combustion engines: Applied Thermosciences.* New York, John Wiley & Sons, 1986.
- [162] SILVA, L. L. C. Simulação Termodinâmica do Ciclo de Trabalho de Motores Diesel. Anais do V Simpósio de Engenharia Automotiva, São Paulo, 4 a 6 de set. de 1989, p.489-503.
- [163] CASTRO, F. L. J. Simulação dos Processos Termodinâmicos em Motores de Ignição por Centelha. Anais do V Simposio de Engenharia Automotiva, São Paulo, 4 a 6 de set. de 1989, p.455-469.
- [164] ANNAND, W. J. D. A New Computation Model of Combustion in the Spark-Ignition Engine. Proc. Instn. Mech. Engrs. 185:119-126, 1970/1971.
- [165] TABACZYNSKI, R. J. ; FERGUSON, C. R. ; RADHAKRISHNAN, K. A Turbulent Entrainment Model for a Spark-Ignition Engine Combustion. SAE Trans. 770647, 1977, p.2414-2433.
- [166] HIRES, S. D. ; TABACZYNSKI, R. J. ; NOVAK, J. M. The Prediction of Ignition Delay and Combustion Intervals for a Homogeneous Charge, Spark Ignition Engine. SAE Trans. 760232, 1976, p.1053-1067.
- [167] MOREL, T. ; RACKMILL, C. I. ; KERLBAR, R. ; JENNINGS, M. J. Model for Heat Transfer and Combustion in Spark Ignited Engines and its Comparison with Experiments. SAE Trans. 880198, 1988, p.6.348-6.362.

- [168] HIRST, S.L. & KIRSCH, L.J. The Application of a Hydrocarbon Autoignition Model in Simulating Knock and Other Engine Combustion Phenomena. In: MATTAVI, J.N. & AMANN, C.A. *Combustion Modelling in Reciprocating Engines*. New York, Plenum Press, 1980, p.193-229.
- [169] MATTAVI, J.N. & AMANN, C.A. - editors. *Combustion Modelling in Reciprocating Engines*. New York, Plenum Press, 1980 (Symposium held at General Motors Research Laboratories.)
- [170] HORLOCK, J.H. & WINTERBONE, D.E. - editors. *The Thermodynamics and Gas Dynamics of Internal Combustion Engines*. Oxford, Clarendon Press, 1986. Vol.2.
- [171] RAMOS, J.I. *Internal Combustion Engines Modeling*. New York Hemisphere, 1989.
- [172] IINUMA, K. Recent Advances in Spark - Ignition Engine Combustion Research. JSME Int.J. 30(262):553-559, 1987.
- [173] ANDOH, K.; YONEMOCHI, K.; KAWAJIRI, I.; SAKUMA, K.; TANABE, H.; SATO, G.T. Combustion Characteristics of Various Alternative Fuels in S.I. Engine. SAE Trans. 811384, 1981, p.4148-4166.
- [174] YELLIN, E.L. & PESKIN, C.S. Large Amplitude Pulsatile Water Flow Across an Orifice. Trans. ASME J. Dynamic Systems Measurement and Control. March 1978, p.92-95.
- [175] HUBER, P.H. & BROWN, J.R. Computation of Instantaneous Air Flow and Volumetric Efficiency. SAE Trans. 73:698-717, 1965.
- [176] KASTNER, L.J.; WILLIAMS, T.J.; WHITE, J.B. Poppet Inlet Valve Characteristics and Their Influence on the Induction Process. Proc. Instn. Mech. Engrs. 178(36):955-978, Pt.1, 1963/1964.
- [177] LAFORGIA, D. & FICARELLA, A. Poppet Valve Flow Characteristics in Internal Combustion Engines. 12d. Annual Energy Sources Technology Conference and Exhibition, The Internal Combustion Engine Division, ASME. UZKAN, T. editor. Basic Processes in Internal Combustion Engines, vol.6, 1989, p.33-43.
- [178] HORLOCK, J.H. & WOODS, W.A. Calculation of Non-steady Flows Using Filling and Emptying Methods and Quasi-steady Flow Models. In: HORLOCK, J.H. & WINTERBONE, D.E. (editors) *The Thermodynamics and Gas Dynamics of Internal Combustion Engines V.II*. Oxford, Clarendon Press, 1986, p.583-615.
- [179] BENSON, R.S. & GALLOWAY, K. An Experimental and Analytical Investigation of the Gas Exchange Process in a Multi-Cylinder Pressure-Charged Two-Stroke Engine. Proc. Instn. Mech. Engrs. 183(14):253-279, 1968/69.

- [180] BENSON, R. S. ; BARUAH, P. C. , WHELAN, B. Simulation Model for a Crankcase-Compression Two-Stroke Spark-Ignition Engine Including Intake and Exhaust Systems. Proc. Instn. Mech. Engrs. 189:167-175, 1975.
- [181] FERRARI, G. Simulazione del Processo di Aspirazione e Scarico di un Motore a Quattro-Tempi. La Termotecnica 29(7):397-408, 1975.
- [182] BENSON, R. S. *The Thermodynamics and Gas Dynamics of Internal Combustion Engines.* Oxford, Clarendon Press, 1984. Vol.1.
- [183] GISH, R. E.; MCCOLLOUGH, J. D. ; RETZLOFF, J. B. ; MUELLER, H. T. Determination of True Engine Friction. SAE Trans. v.66 1958, p.649-667.
- [184] BISHOP, I. N. Effect of Design Variables on Friction and Economy. SAE Trans. v.73, 1965, p.334-358.
- [185] MILLINGTON, B. W. & HARTLES, E. R. Frictional Losses in Diesel Engines. SAE Trans. 680590, 1968, p.2390-2410.
- [186] ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS Apresentação de Desempenho de Motores Alternativos de Combustão Interna. Procedimento. Norma ABNT NBR 5477, de julho de 1982.
- [187] GALLO, W. L. R. Análise Paramétrica de um Motor de Combustão Interna por Simulação em Computador. Anais do V Simposio de Engenharia Automotiva. São Paulo, 4 a 6 de setembro 1989, p.504-518.
- [188] VELASQUEZ, J. A. & MILANEZ, L. F. Avaliação do Processo de Combustão em Motores Diesel Usando Análise de Segunda Lei Trabalho aceito para apresentação e publicação nos Anais do III Encontro Nacional de Ciências Térmicas. Itapema, SC, a se realizar de 10 a 12 de dezembro de 1990.
- [189] TAYLOR, C. F. *Análise dos Motores de Combustão Interna.* São Paulo, Edgard Blucher e Editora da Universidade de São Paulo, 1971. (2 vol.).
- [190] ASMUS, T. W. Valve Events and Engine Operation. SAE Trans. 820749, 1982, p.2520-2533.

APÊNDICE 1: COMPOSIÇÃO QUÍMICA DOS PRODUTOS DE COMBUSTÃO

Usando a hipótese de equilíbrio químico e a metodologia de cálculo mostrada no Capítulo 3, é possível determinar a composição química dos produtos de combustão. Exemplos do emprego das sub-rotinas de cálculo de composição química são apresentados neste Apêndice.

As Figuras A1.1 a A1.12 mostram as frações molares de cada substância que compõe os gases de combustão resultantes da queima de gasolina com ar seco na proporção estequiométrica, em função da temperatura e para diferentes pressões. A gasolina foi aproximada pelo octano (C_8H_{18}) a fim de possibilitar uma comparação com outros resultados.

Embora várias referências pudessem ser empregadas para comparação de resultados [90, 92, 96, 106], a comparação deste grupo de figuras é feita com os resultados da referência [23], exceto para o nitrogênio atômico e para o argônio, que não foram considerados naquele trabalho. A referência [92] foi usada como comparação no caso do nitrogênio atômico. As demais referências mencionadas acima não apresentavam um formato que permitisse uma comparação direta, quer por empregar outras unidades de pressão, quer por não indicar claramente qual a aproximação adotada para a gasolina. Todas as tendências verificadas nas referências que não foram empregadas explicitamente, porém, foram verificadas.

A diferença entre os valores obtidos neste trabalho e na referência [23] para o nitrogênio (fig. A1.1) reside na presença do argônio (fig. A1.2), que aqui foi considerado em separado e que era considerado como integrante do nitrogênio (o chamado "nitrogênio aparente") no trabalho de Patterson. Para as demais substâncias, a concordância é muito boa apesar de que os valores foram lidos em gráficos de pequena resolução e apesar da base de dados de Patterson ser uma versão mais antiga da que foi utilizada neste trabalho.

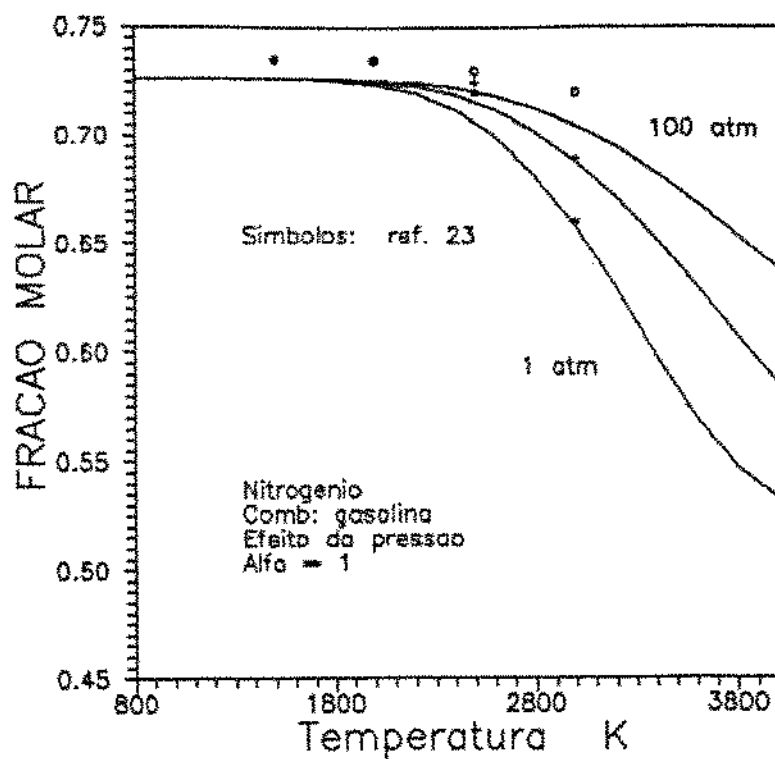


Figura A1.1 - Comparação com a ref.[23]: Nitrogênio.

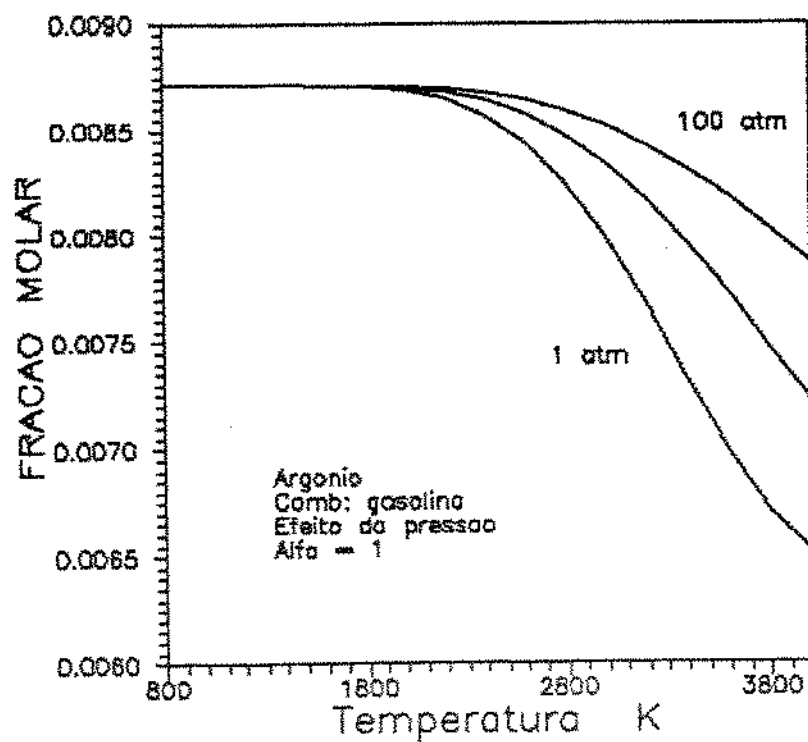


Figura A1.2 - Fração molar do Argônio.

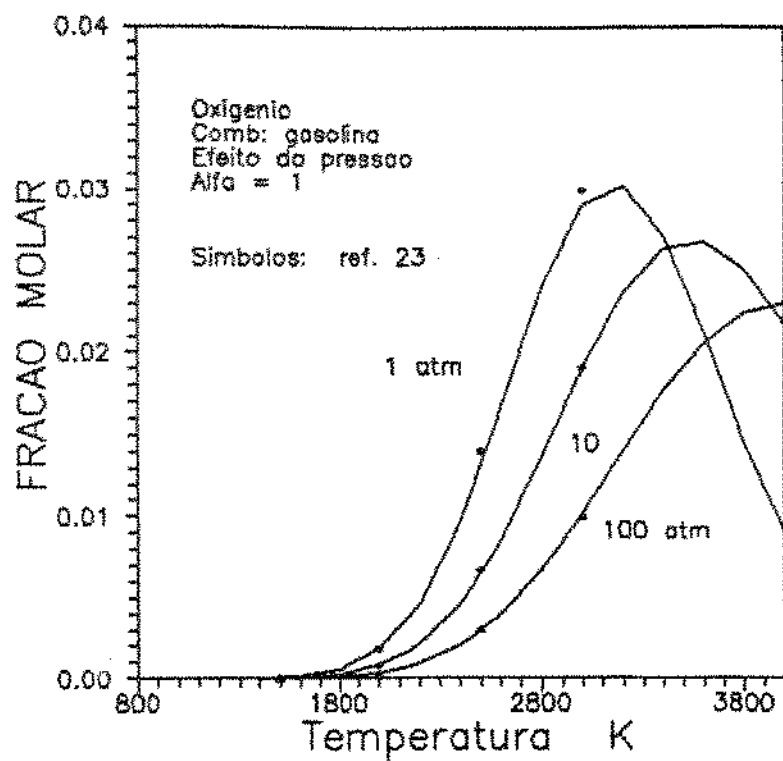


Figura A1.3 - Comparação com a ref.[23]: Oxigênio.

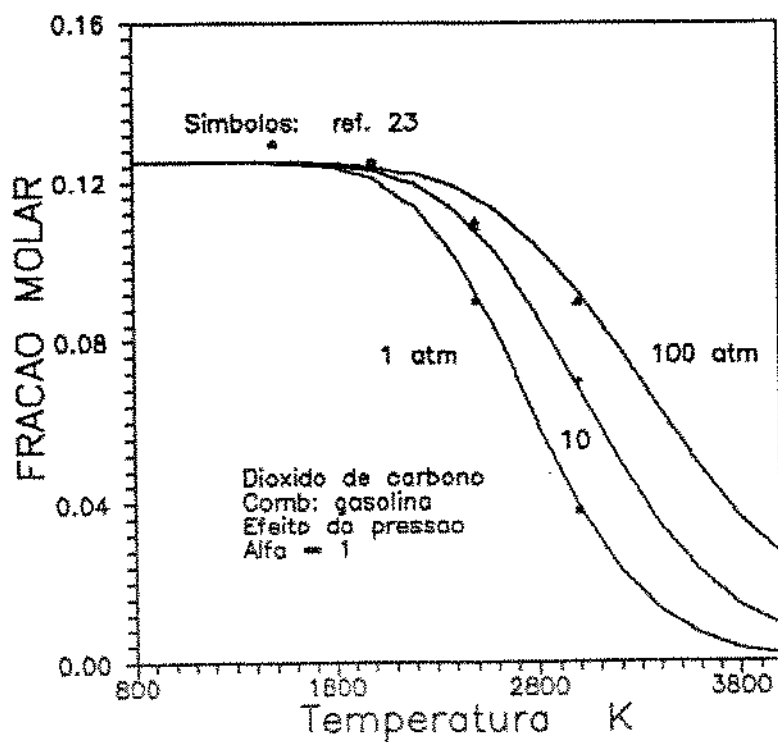


Figura A1.4 - Comparação com a ref.[23]: Dióxido de Carb.

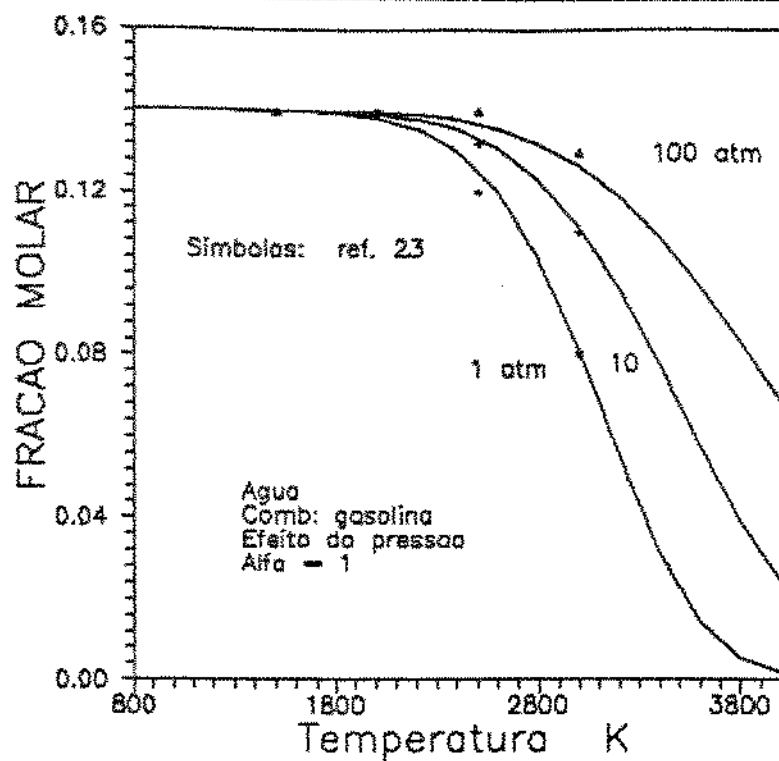


Figura A1.5 - Comparação com a ref.[23]: Água.

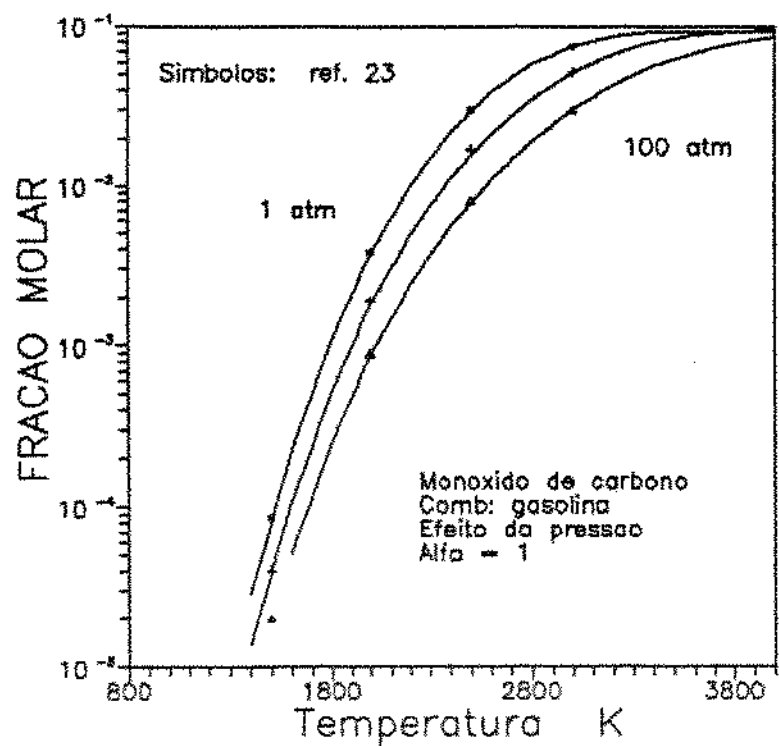


Figura A1.6 - Comparação com a ref.[23]: Monóxido de Carb.

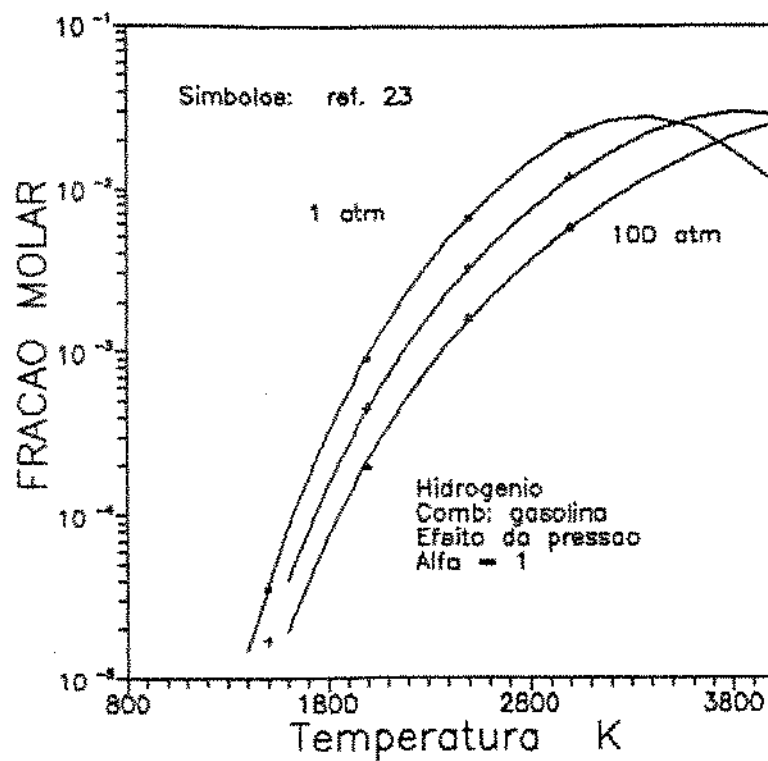


Figura A1.7 - Comparação com a ref.[23]: Hidrogênio.

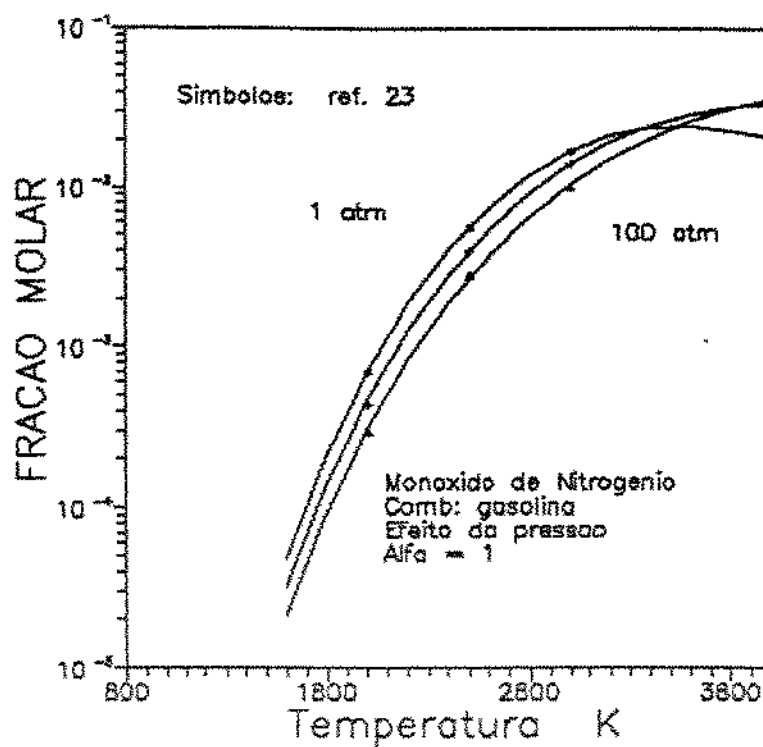


Figura A1.8 - Comparação com a ref.[23]: Monóxido de Nitrog.

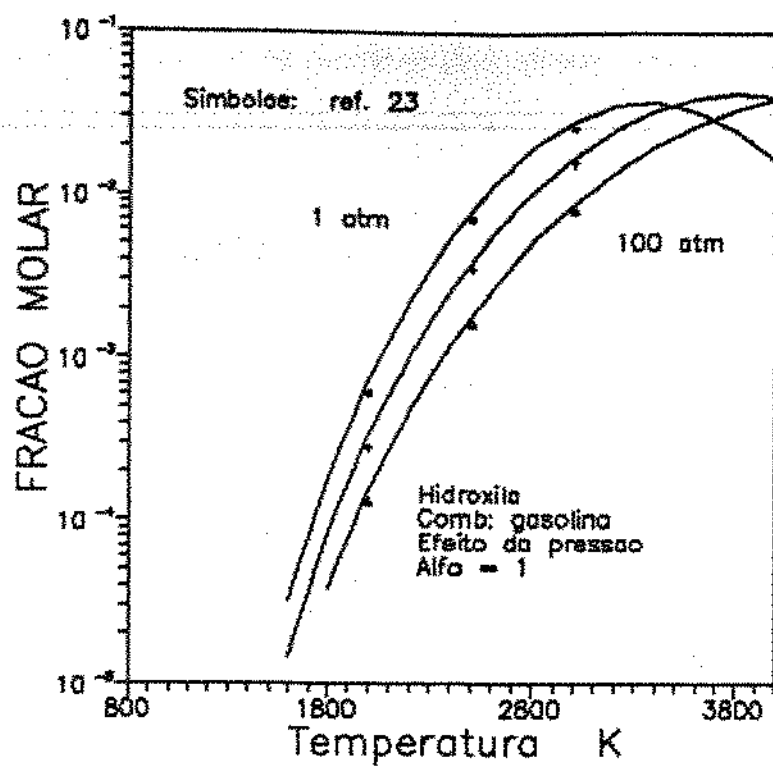


Figura A1.9 - Comparação com a ref.[23]: Hidroxila.

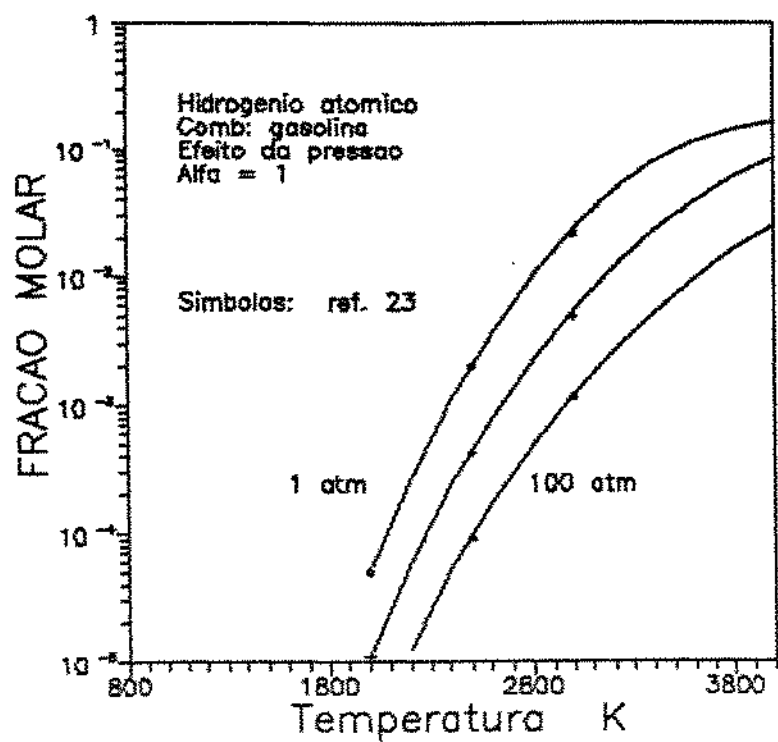


Figura A1.10 - Comparação com a ref.[23]: Hidrogênio Atôm.

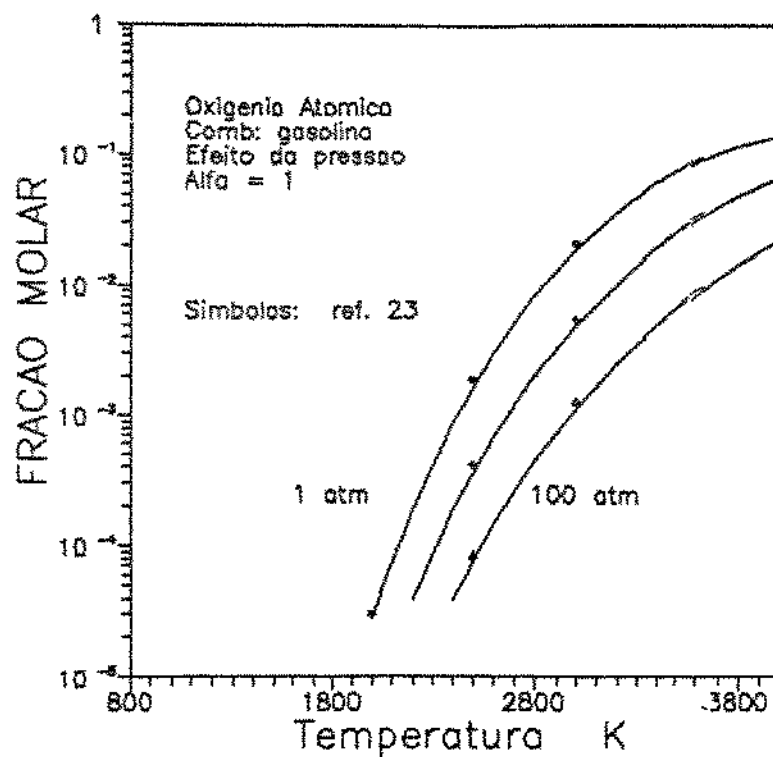


Figura A1.11 - Comparação com a ref.[23]: Oxigênio Atôm.

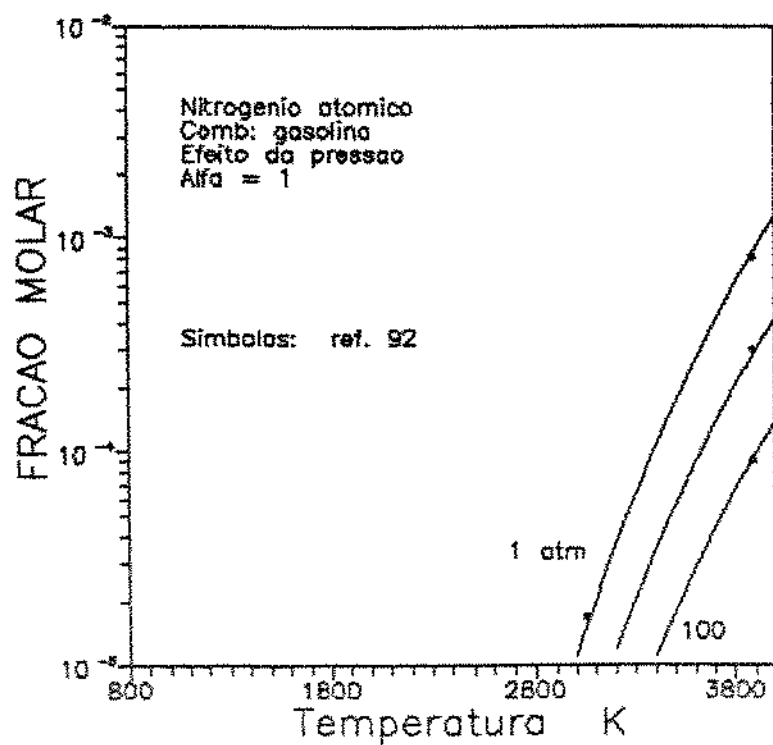
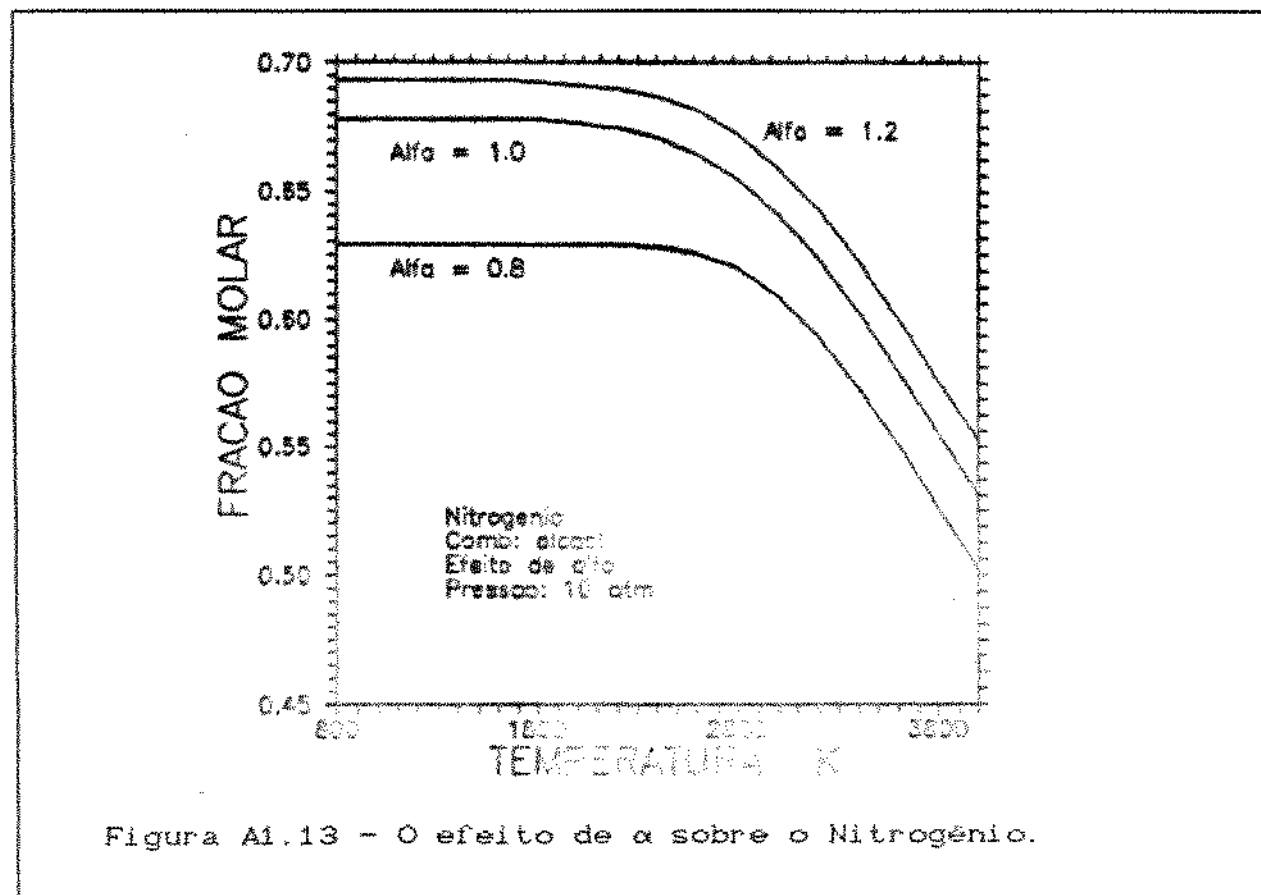


Figura A1.12 - Comparação com a ref.[92]: Nitrog. Atôm.

O segundo conjunto de resultados, mostrado nas Figuras A1.13 a A1.24, refere-se ao efeito do coeficiente de ar teórico sobre as frações molares das doze substâncias consideradas como constituintes dos produtos de combustão. O combustível, neste caso, é o AEHC - álcool etílico hidratado carburante - com um teor alcoólico de 93,9 INPM, que constitui a maior gradação alcoólica definida pelo Conselho Nacional do Petróleo para o AEHC comercial.

Comparando os gráficos obtidos para o álcool com valores da referência [92] para a gasolina, verifica-se que as tendências todas se mantêm, embora os valores das frações molares sejam diferentes devido à composição molecular e à relação ar-combustível estequiométrica dos dois combustíveis serem diferentes.

Deve-se observar particularmente os gráficos A1.14 a A1.18, que se referem respectivamente ao oxigênio, dióxido de carbono, água, monóxido de carbono e hidrogênio, e possuem um comportamento completamente diferente quer se trate de uma mistura rica ($\alpha < 1$) ou de uma mistura pobre ($\alpha > 1$).



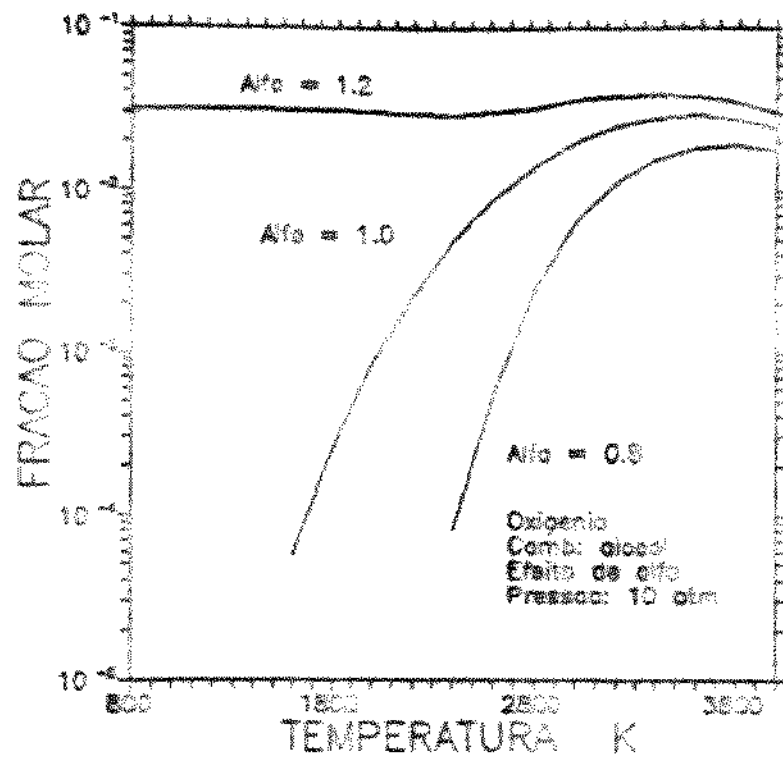


Figura A1.14 - O efeito de α sobre o Oxigênio.

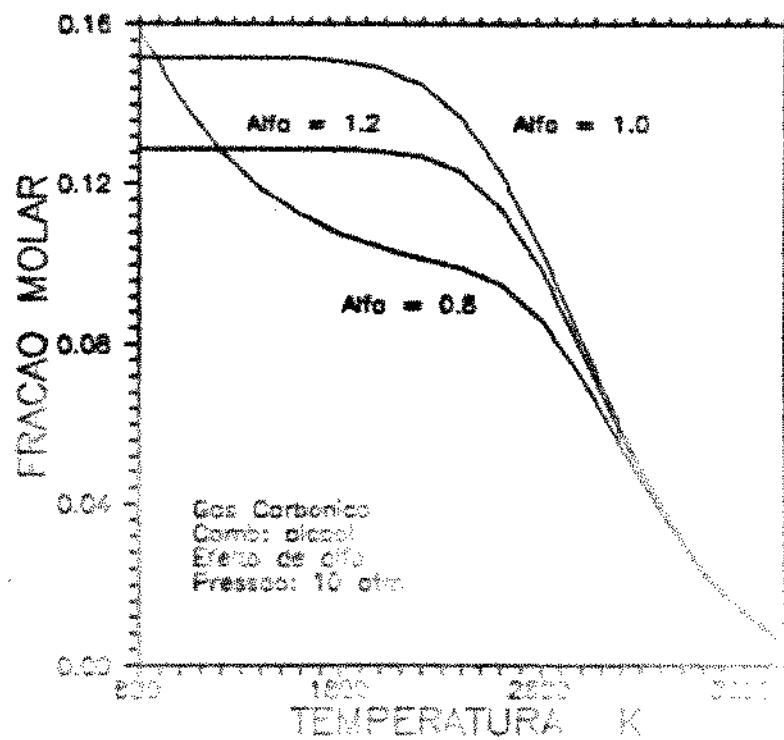


Figura A1.15 - O efeito de α sobre o Dióxido de Carbono.

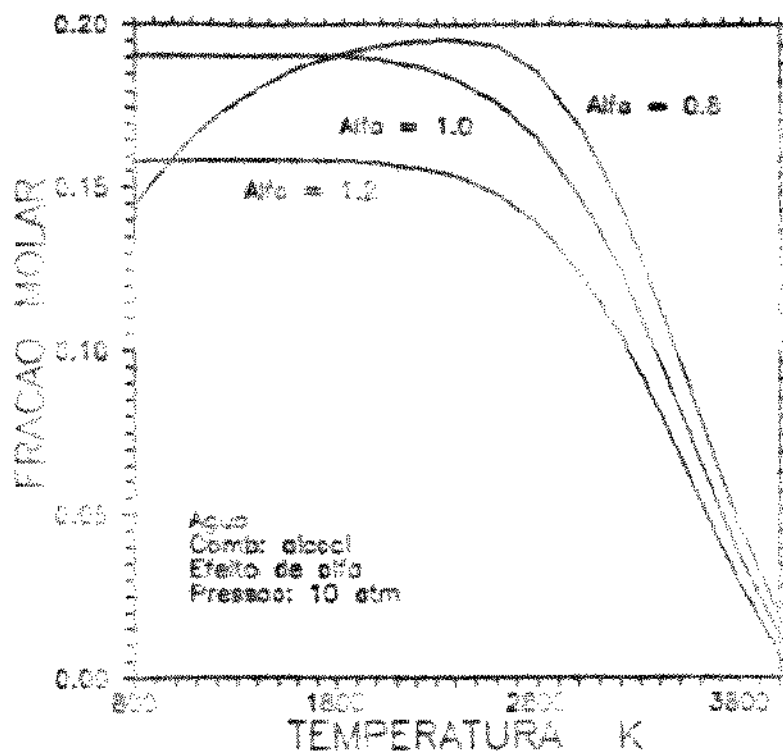


Figura A1.16 - O efeito de α sobre a Água.

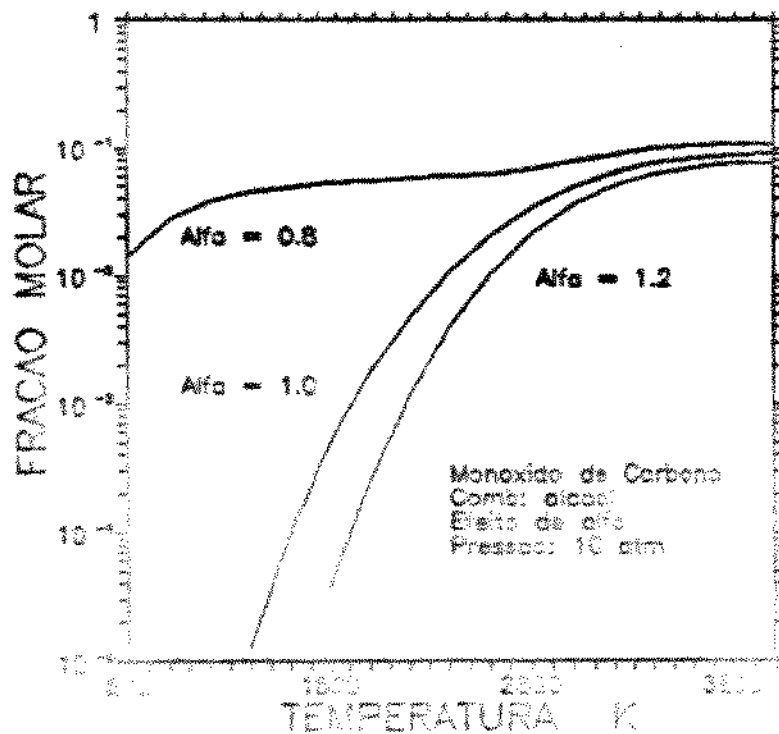


Figura A1.17 - O efeito de α sobre o Monóxido de Carb.

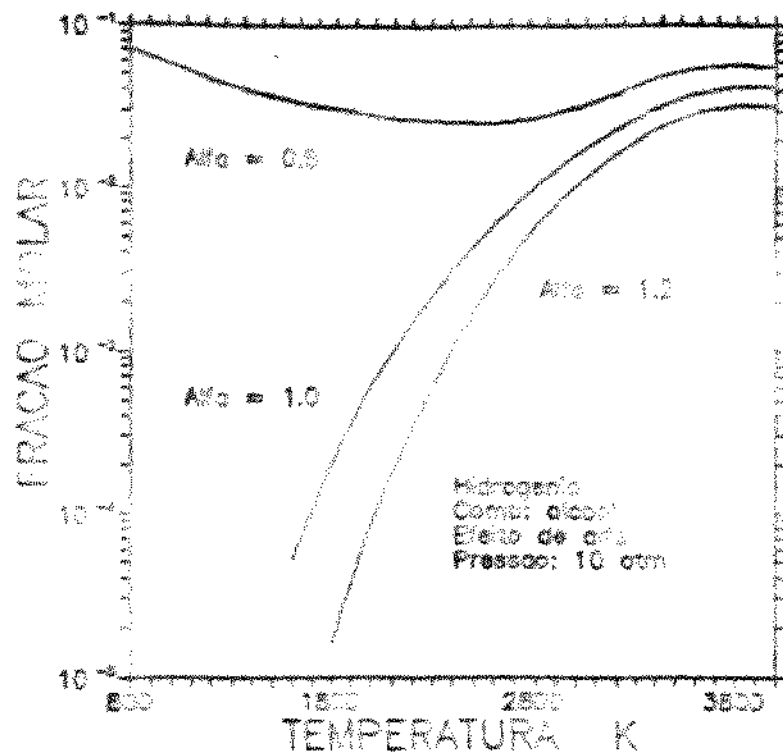


Figura A1.18 - O efeito de α sobre o Hidrogênio.

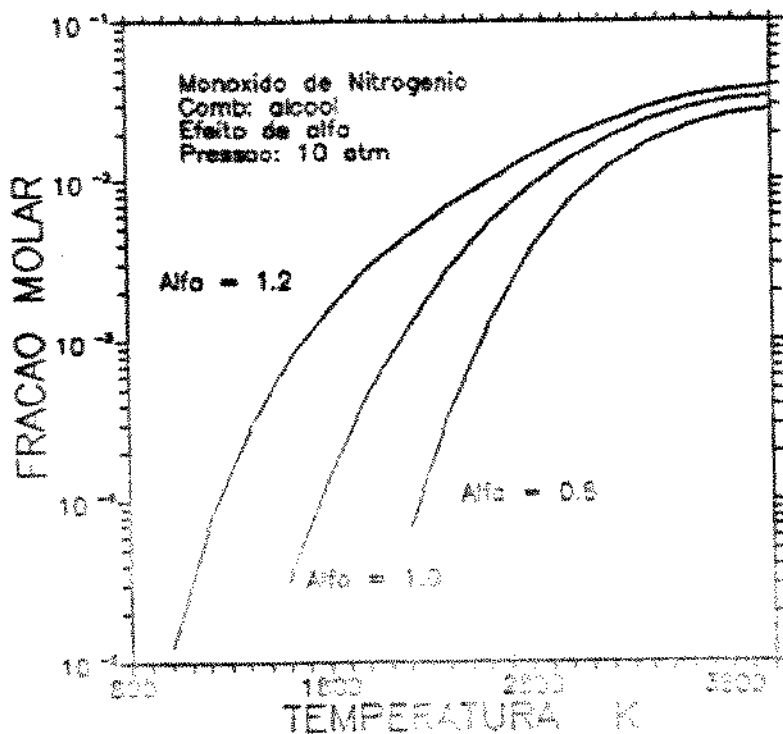


Figura A1.19 - O efeito de α sobre o Monóxido de Nitrog.

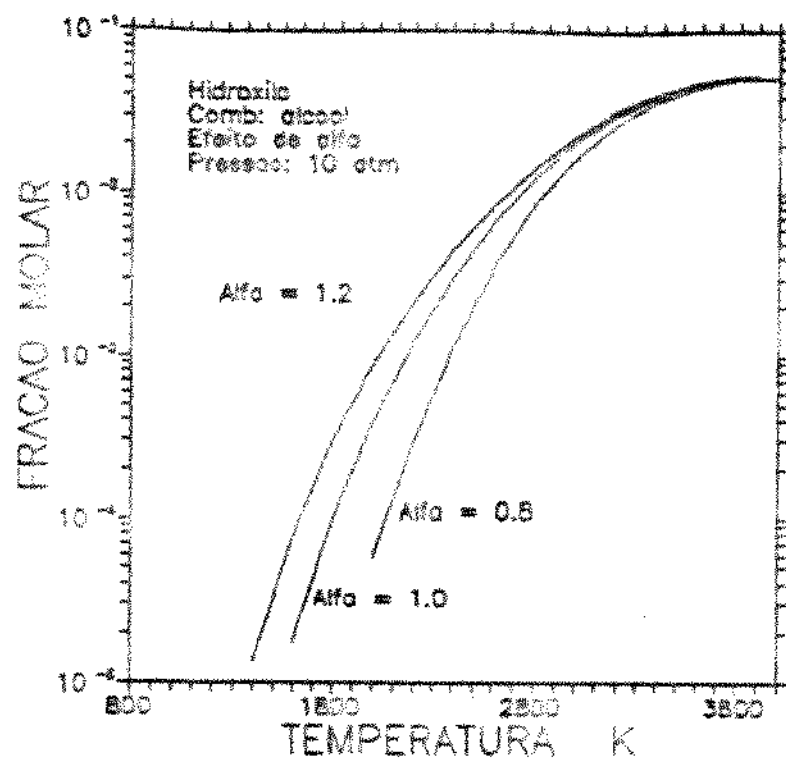


Figura A1.20 - O efeito de α sobre a Hidroxila.

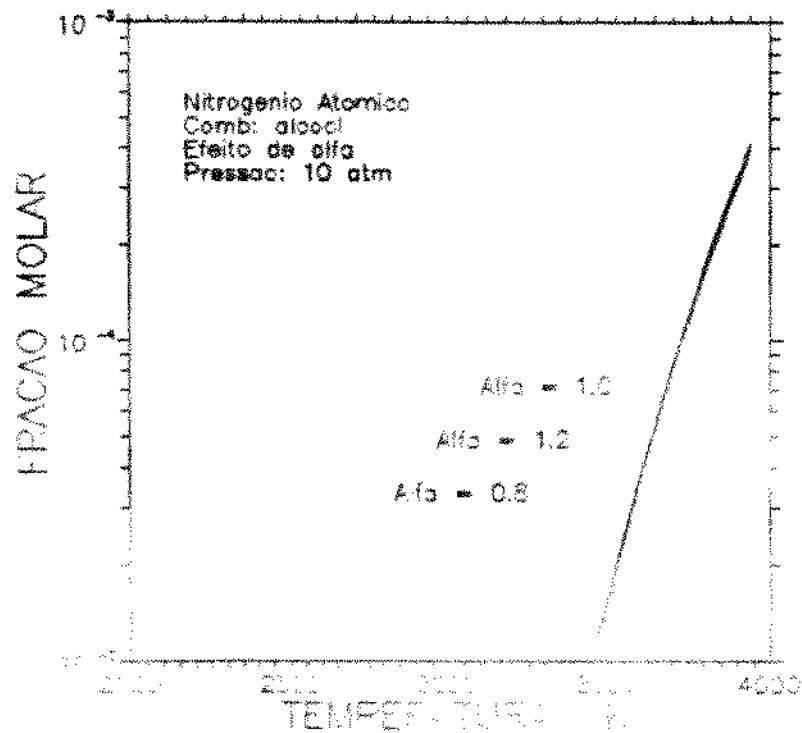


Figura A1.21 - O efeito de α sobre o Nitrogênio Atômico.

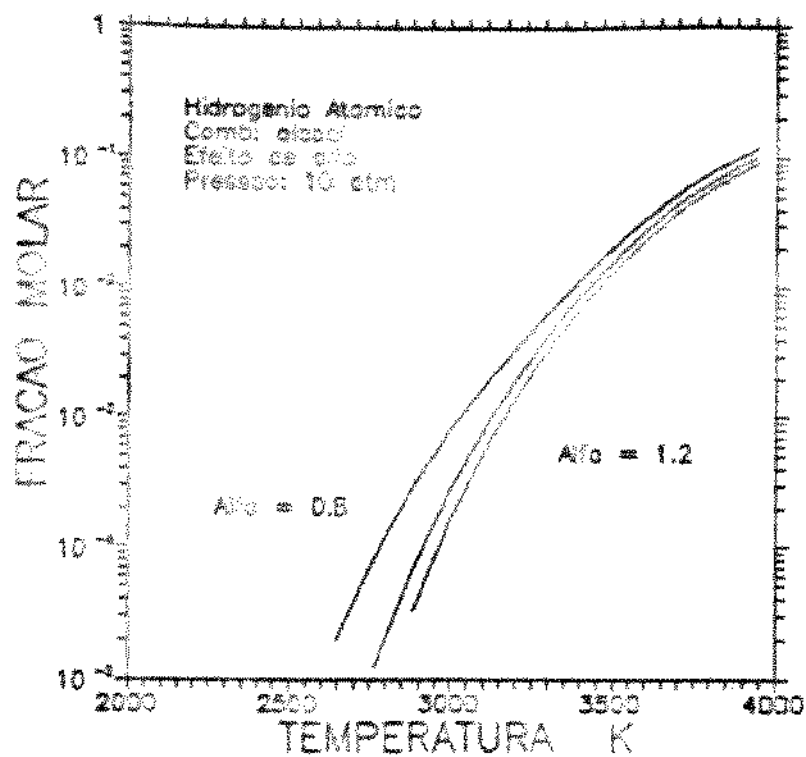


Figura A1.22 - O efeito de α sobre o Hidrogênio Atômico.

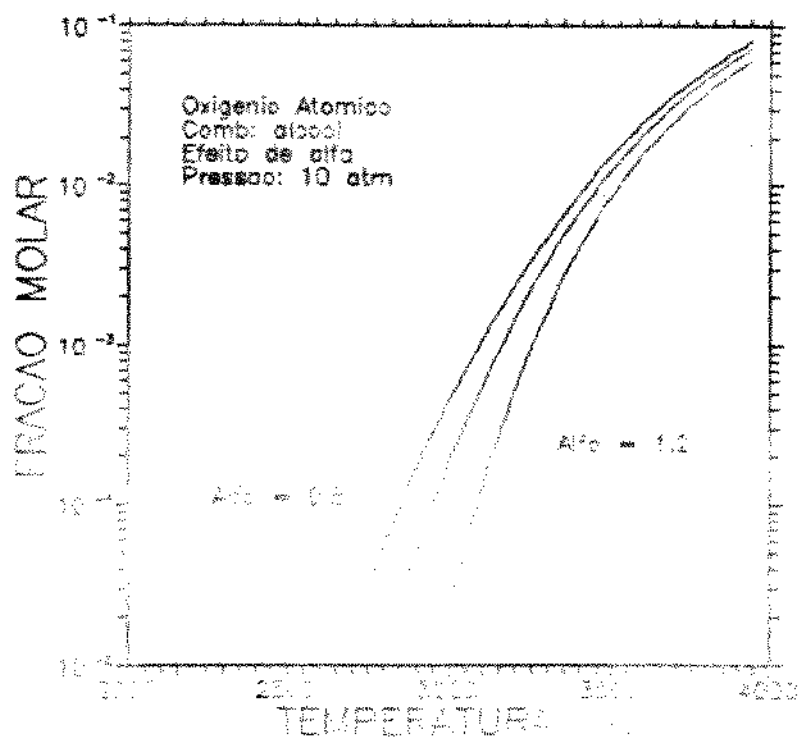
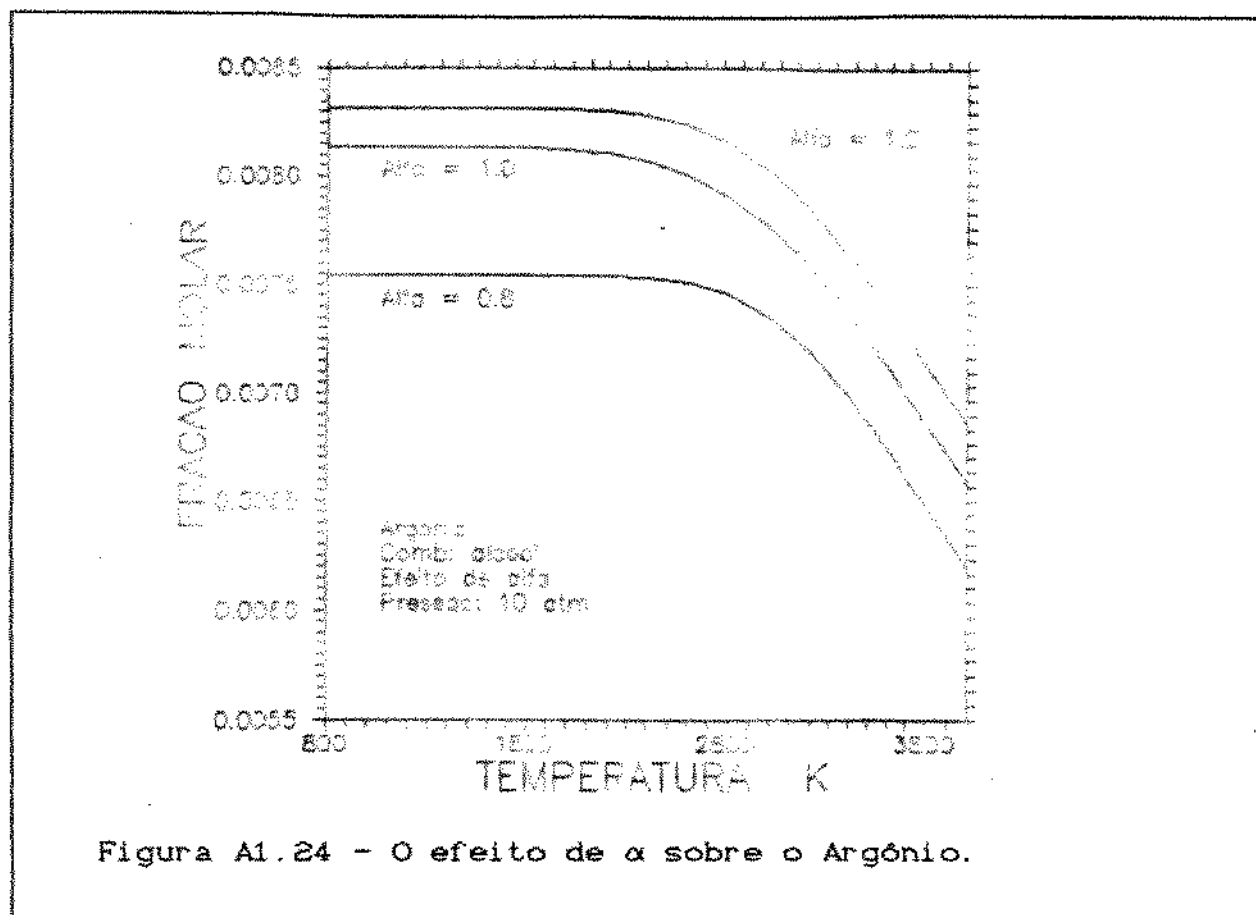


Figura A1.23 - O efeito de α sobre o Oxigênio Atômico.



No caso da gasolina, os resultados obtidos em função do coeficiente de ar teórico (α) são qualitativamente similares aos obtidos para o AEHC. Apenas como exemplo, nas Figuras A1.25 e A1.26 são apresentados os resultados obtidos para as frações molares de Nitrogênio e de Oxigênio. Os pontos indicados na figura representam os valores da referência [92]. Para as demais substâncias, o grau de concordância é ainda maior entre os dois resultados.

O efeito do teor alcoólico do AEHC foi verificado, tomando os valores limites indicados pelo CNP (91,1 a 93,9 INPM) e ainda o etanol puro, como caso extremo. Estão apresentadas nas Figuras A1.27 e A1.28 apenas as frações molares da água e do nitrogênio, que são as que traduzem as diferenças mais significativas. A diferença entre as frações molares pode atingir cerca de 2% mas tende a diminuir à medida que aumenta a temperatura e os efeitos de dissociação passam a ser mais importantes.

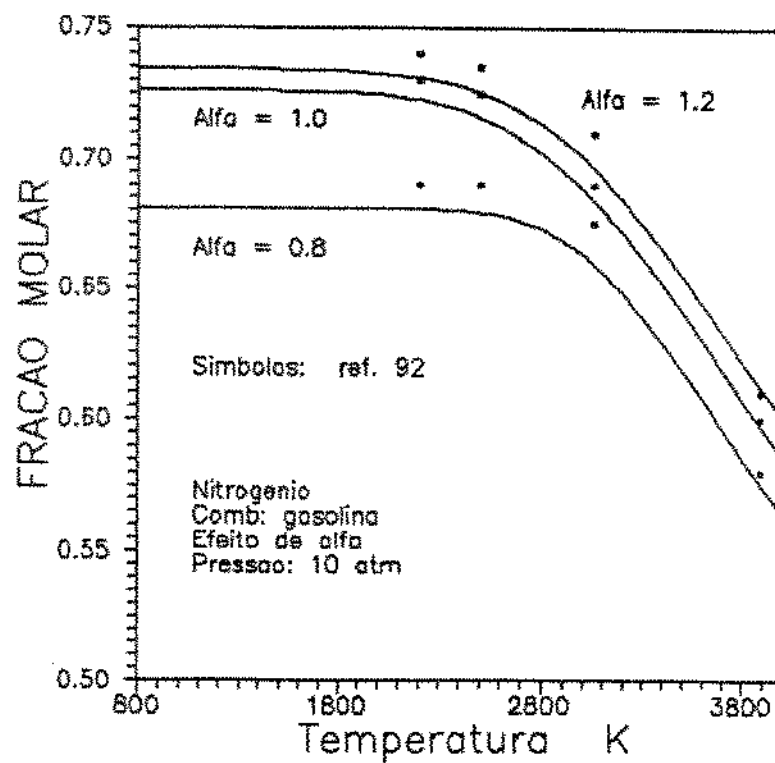


Figura A1.25 - O efeito de α sobre o Nitrogênio.

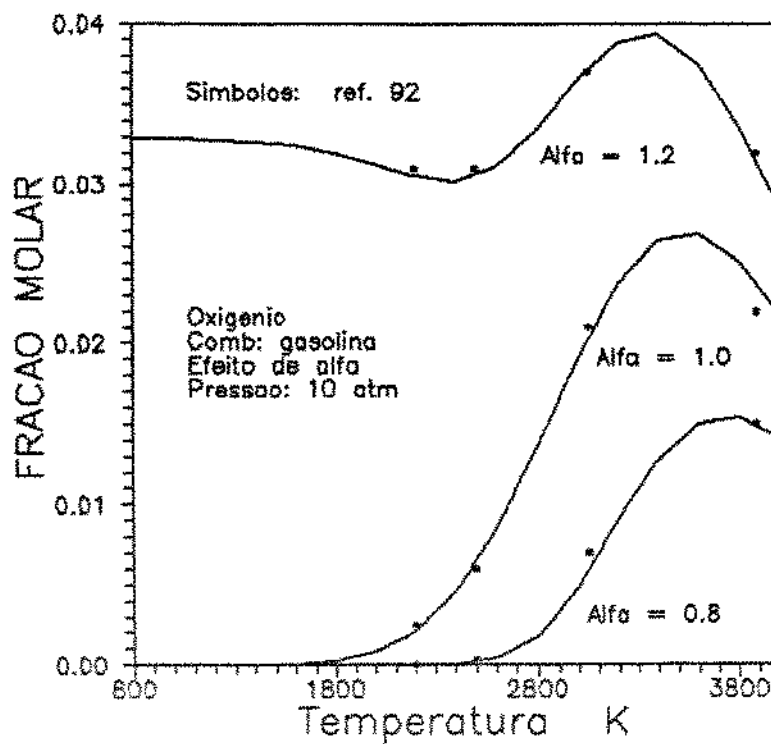


Figura A1.26 - O efeito de α sobre o Oxigênio.

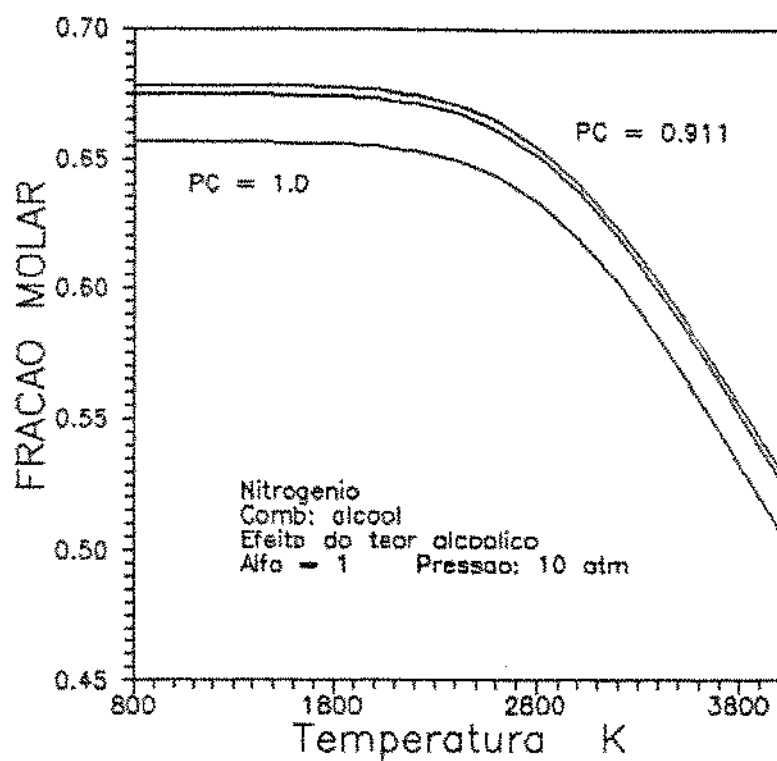


Figura A1.27 - O efeito do teor alcoólico: Nitrogênio.

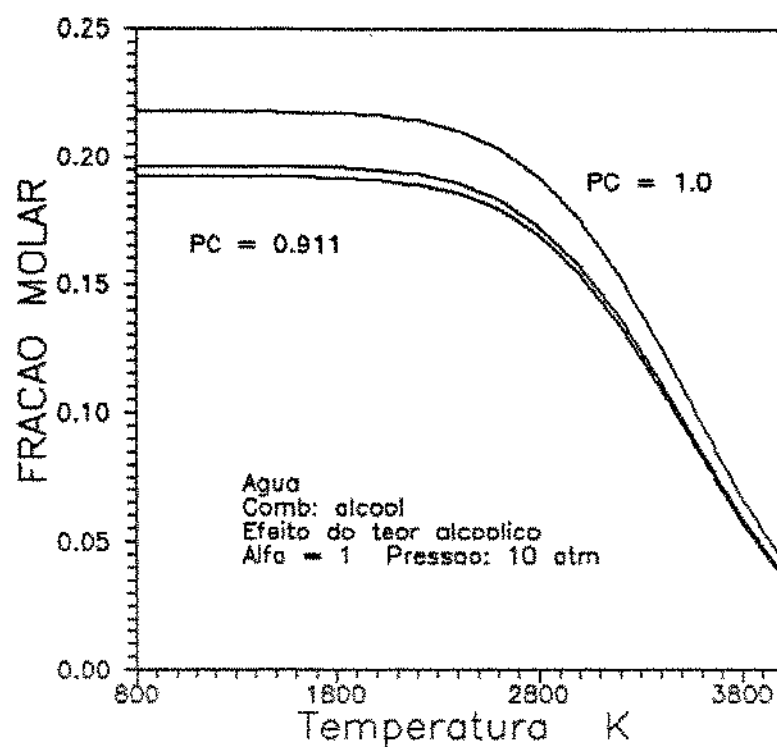
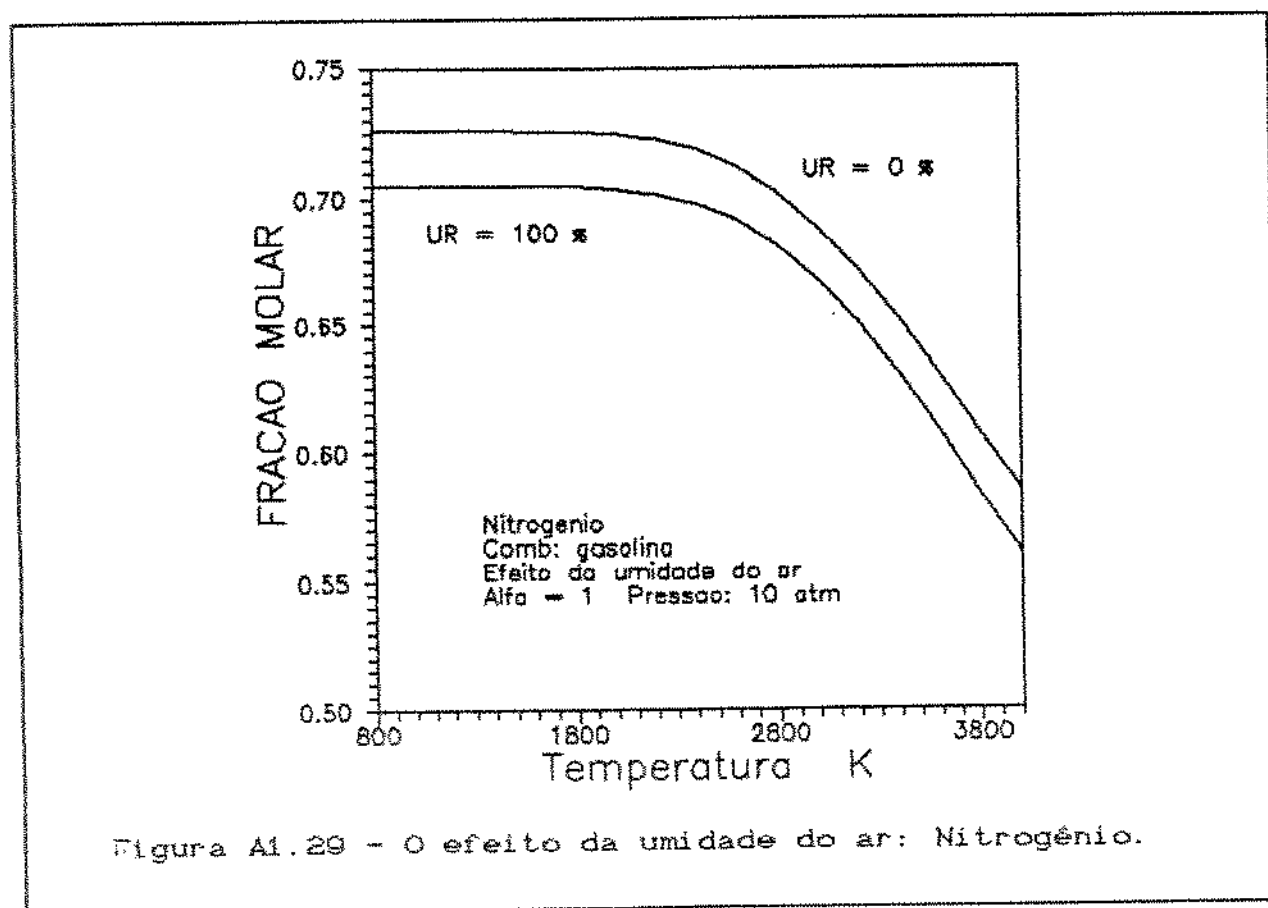


Figura A1.28 - O efeito do teor alcoólico: Água.

Uma das características que distingue a formulação desenvolvida neste trabalho de outras abordagens para a determinação da composição química dos produtos de combustão consiste na inclusão do efeito da umidade do ar. Todos os trabalhos citados consideram apenas o ar seco; todavia, a umidade do ar pode desempenhar um papel bastante importante sobre a composição dos produtos de combustão. Nas Figuras A1.29 e A1.30, são representadas as frações molares de Nitrogênio e de Água, respectivamente, após a queima do octano, para uma variação na umidade relativa do ar entre 0 e 100 %, na temperatura padrão de 25°C.

Da Figura A1.29, verifica-se que a fração molar do nitrogênio pode ser afetada em cerca de 3 % quando a umidade relativa passa de 0 a 100 %. No caso da água, o efeito é ainda mais pronunciado: cerca de 10 % de diferença. Outra característica da umidade do ar é que o efeito é marcante mesmo quando a temperatura aumenta e os efeitos de dissociação começam a se fazer presentes.



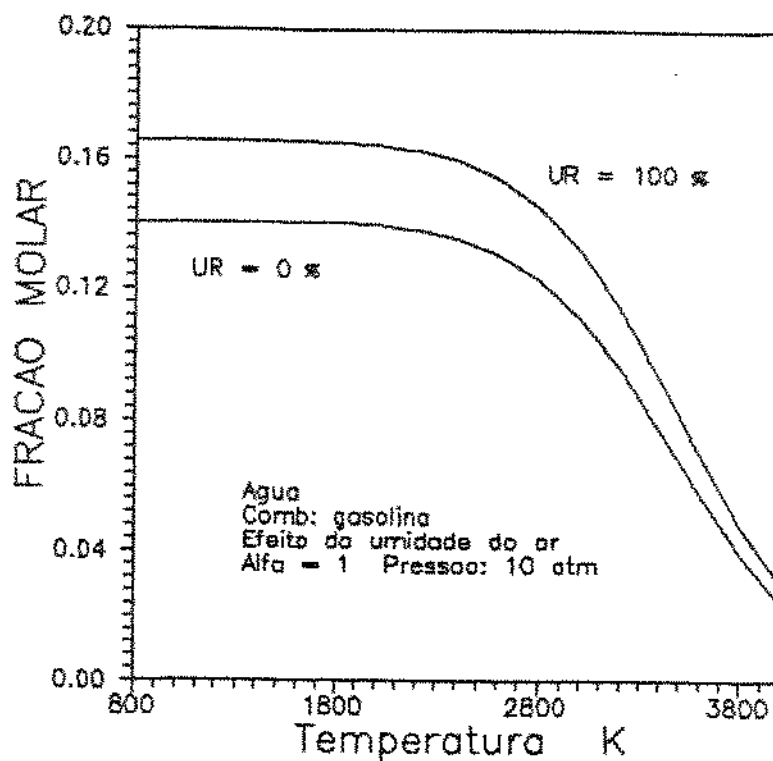


Figura A1.30 - O efeito da umidade do ar: Água.

Como último exemplo, as Figuras A1.31 e A1.32 mostram os resultados para o efeito combinado entre a umidade do ar e a umidade presente no combustível, nos casos extremos: álcool anidro em ar seco e AEHC com o menor teor alcoólico em ar saturado de umidade. Nesse caso, a diferença entre os casos limites é de cerca de 4 % para a fração molar de nitrogênio e de cerca de 20 % para a fração molar de água. Para as demais substâncias, o efeito é da mesma ordem de grandeza do que para o nitrogênio (em termos percentuais), embora menos relevantes pois os valores das frações molares são menores.

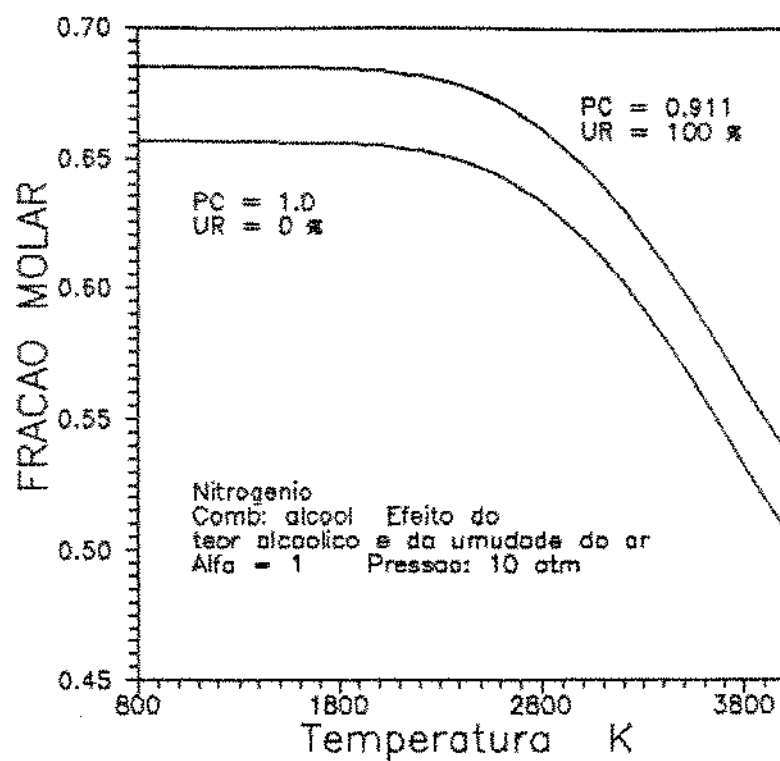


Figura A1.31 - Efeito combinado: umidade do ar e do AEHC.

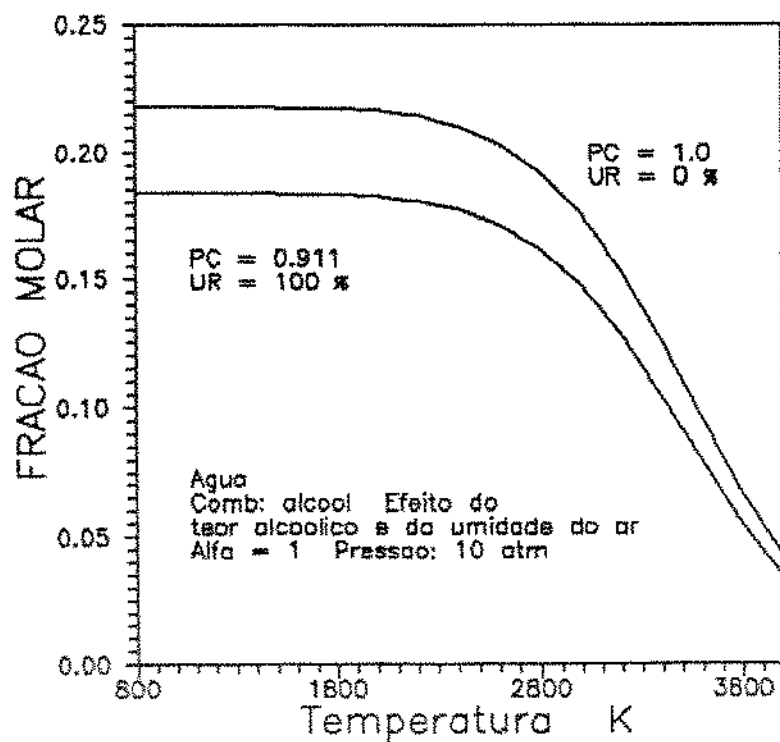


Figura A1.32 - Efeito combinado: umidade do ar e do AEHC.

APÊNDICE 2: RELAÇÕES GEOMÉTRICAS

A.2.1 - A elevação instantânea das válvulas

A hipótese de que a elevação de válvula seja parabólica, segundo Sherman e Blumberg [122], se aproxima bastante da elevação real e é simples de tratar analiticamente. A figura A.2.1 mostra a elevação instantânea, a velocidade da válvula e sua aceleração, de acordo com o modelo parabólico.

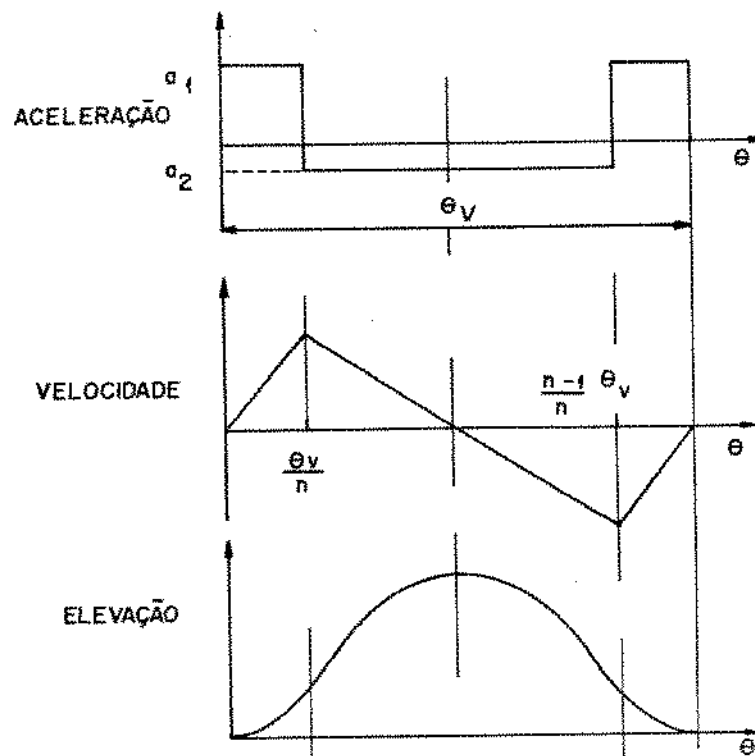


Figura A.2.1 - Elevação, velocidade e aceleração de uma válvula: modelo parabólico.

Na prática é impossível para o sistema mecânico de acionamento das válvulas operar com mudanças bruscas de aceleração; necessariamente a curva de aceleração deve ser suave. Todavia, como a aceleração deve ser integrada duas vezes para se obter a elevação da válvula, há um processo de suavização que faz com que a elevação obtida pelo modelo parabólico não seja muito diferente da real.

Da figura A.2.1 pode-se ver que a elevação é composta pela concordância de três parábolas. Assim, de maneira genérica, as expressões para a elevação podem ser escritas:

$$L_1 = a_1 \theta^2 + b_1 \theta + c_1 \quad 0 \leq \theta \leq \theta_v / n \quad (A2.1)$$

$$L_2 = a_2 \theta^2 + b_2 \theta + c_2 \quad \theta_v/n \leq \theta \leq (n-1)\theta_v/n \quad (A2.2)$$

$$L_3 = a_3 \theta^2 + b_3 \theta + c_3 \quad (n-1)\theta_v/n \leq \theta \leq \theta_v \quad (A2.3)$$

onde θ_v é a duração total do movimento da válvula e n é um valor a ser determinado.

A primeira parábola passa pela origem e possui velocidade nula para o ângulo inicial ($\theta = 0$). Então:

$$b_1 = c_1 = 0 \quad (A2.4)$$

Pela simetria do problema:

$$a_1 = a_3 \quad (A2.5)$$

Para $\theta = \theta_v/2$, ocorre o máximo da segunda parábola. Então:

$$dL_2/d\theta = 0 \Rightarrow 2 a_2 \theta_v/2 + b_2 = 0 \quad (A2.6)$$

$$b_2 = - a_1 \theta_v / r \quad (A2.7)$$

onde r é a razão entre as acelerações a_1 e a_2 .

Para $\theta = \theta_v$ a elevação e a velocidade da válvula são nulas e portanto:

$$dL_s/d\theta = 0 \Rightarrow 2 a_1 \theta_v + b_1 = 0 \quad (A2.8)$$

$$b_1 = -2 a_1 \theta_v \quad (A2.9)$$

$$L_s = 0 \Rightarrow a_1 (\theta_v)^2 + b_1 \theta_v + c_1 = 0 \quad (A2.10)$$

$$c_1 = a_1 (\theta_v)^2 \quad (A2.11)$$

A condição de concordância entre a primeira e a segunda parábolas implica em que não só os valores mas também as derivadas das equações que as representam devem coincidir. Da condição de igualdade das derivadas, para $\theta = \theta_v / n$:

$$2 a_1 \theta_v / n = 2 a_2 \theta_v / n - a_2 \theta_v / n \quad (A2.12)$$

que, considerando a definição de r acima, se reduz a:

$$n = 2 - 2 r \quad (A2.13)$$

e da condição de igualdade dos valores

$$a_1 \left(\frac{\theta_v}{n} \right)^2 = a_2 \left(\frac{\theta_v}{n} \right)^2 - a_2 \theta_v \left(\frac{\theta_v}{n} \right) c_2 \quad (A2.14)$$

de onde se obtém:

$$c_2 = a_1 (\theta_v)^2 \left[\frac{1}{4 r (1 - r)} \right] \quad (A2.15)$$

Finalmente, para $\theta = \theta_v/2$, a elevação é máxima e deve ter um valor conhecido. Neste trabalho, foi empregada a relação entre a elevação máxima e o diâmetro nominal da válvula como forma de adimensionalizar a geometria:

$$YD = L / D \quad (A2.16)$$

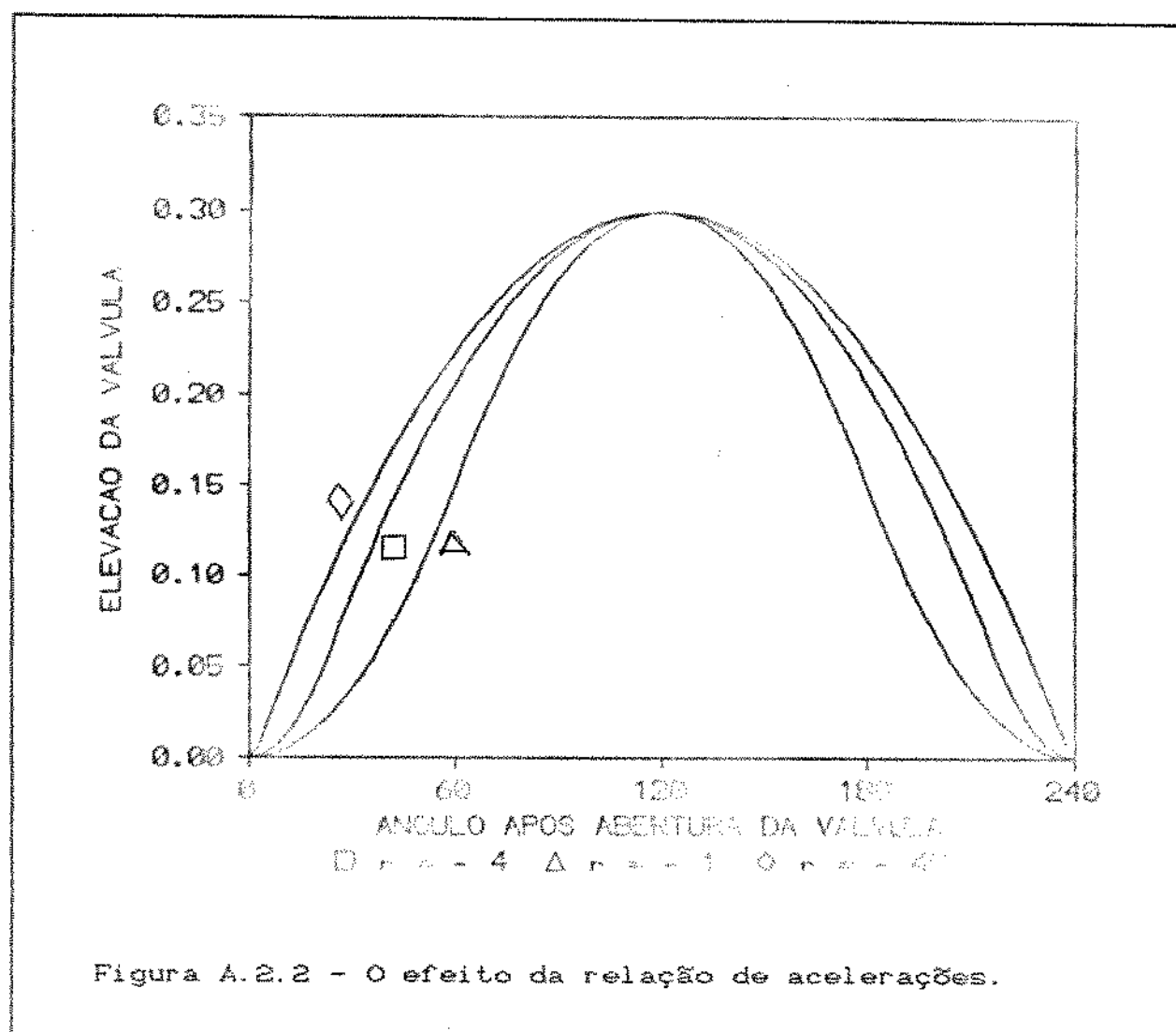
e então deve ser conhecido o valor de $(YD)_{\max}$. Como todas as constantes das expressões das três parábolas estão em função de a_1 ,

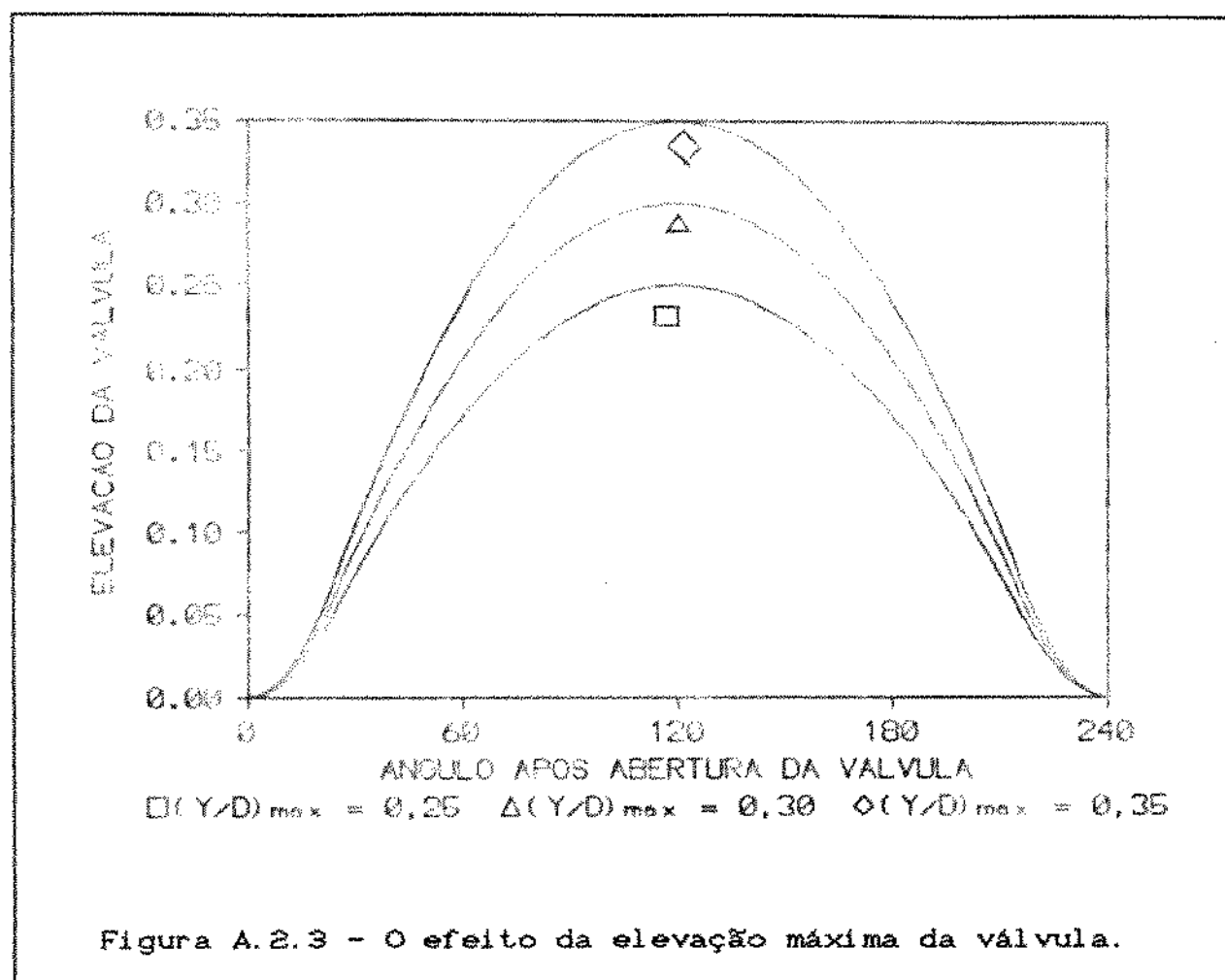
impondo que para $\theta = \theta_v/2$ a elevação L_2 seja igual a $(YD)_{max}$:

$$a_1 = \frac{4 (YD)_{max} (1 - r)}{(\theta_v)^2} \quad (A2.17)$$

Assim, uma vez conhecidos $(YD)_{max}$, a razão entre as acelerações r e a duração do evento θ_v , a elevação instantânea pode ser obtida através das equações desenvolvidas acima.

As figuras A.2.2 e A.2.3 mostram, respectivamente, o efeito da relação entre as acelerações r e o efeito da relação entre a elevação máxima e o diâmetro nominal da válvula $(YD)_{max}$ sobre a elevação instantânea, de forma adimensionalizada.

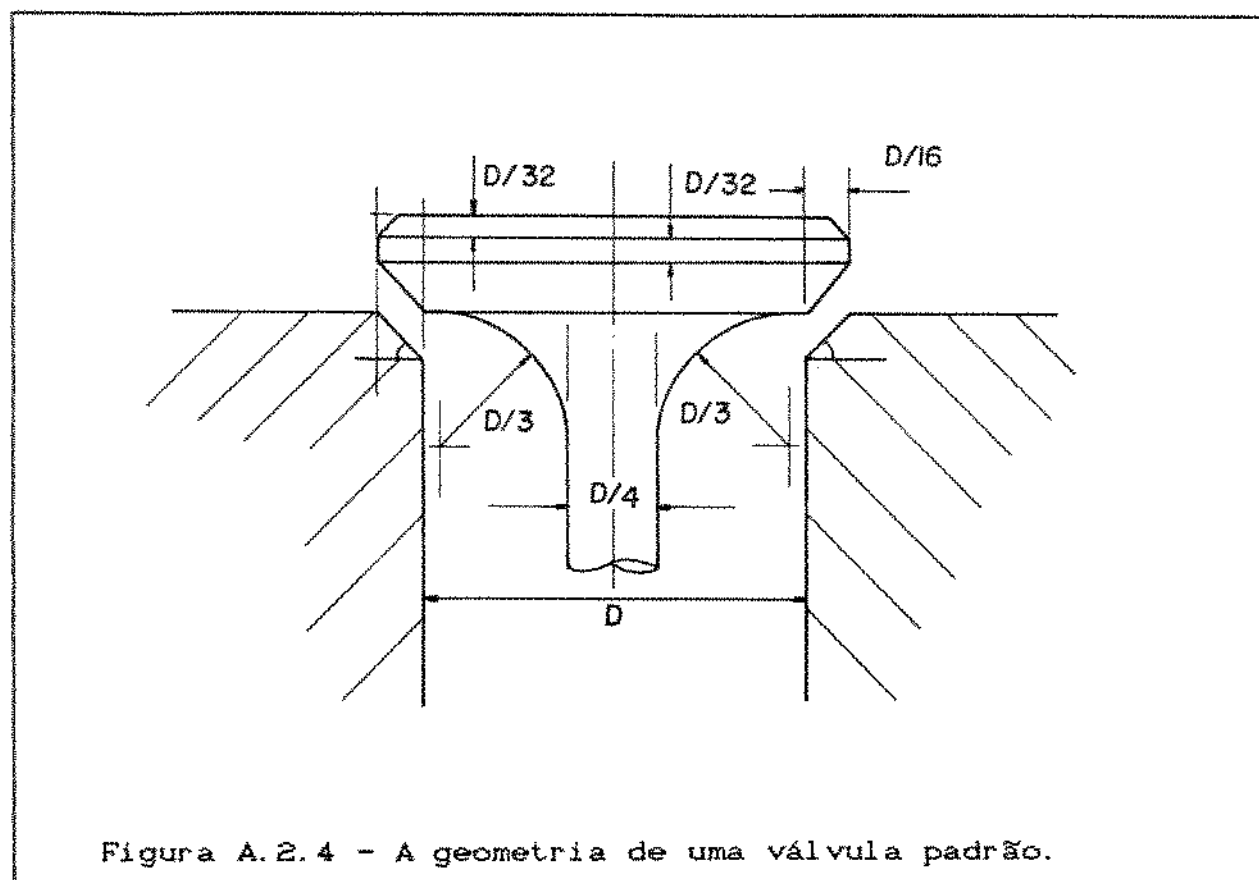




A.2.2 - A área mínima para o escoamento através das válvulas

A área mínima do escoamento através das válvulas é variável, calculada para três diferentes regimes de operação que dependem da geometria da válvula e de seu assento. A figura A.2.4 mostra a geometria típica de uma válvula.

A área mínima de um escoamento sempre é definida na direção perpendicular ao fluxo. Assim, pode-se identificar três regimes distintos de escoamento caracterizados pela distância mínima entre a válvula e sua sede, descritos a seguir.



Caso 1: Pequenas elevações da válvula

Pela figura A.2.5 pode-se ver que a área mínima corresponde à superfície lateral de um tronco de cone cuja geratriz forma um ângulo de 45° com o eixo de simetria, entre o diâmetro nominal da válvula D e $(D + 2 h \cos 45^\circ)$, que é dada por [121]:

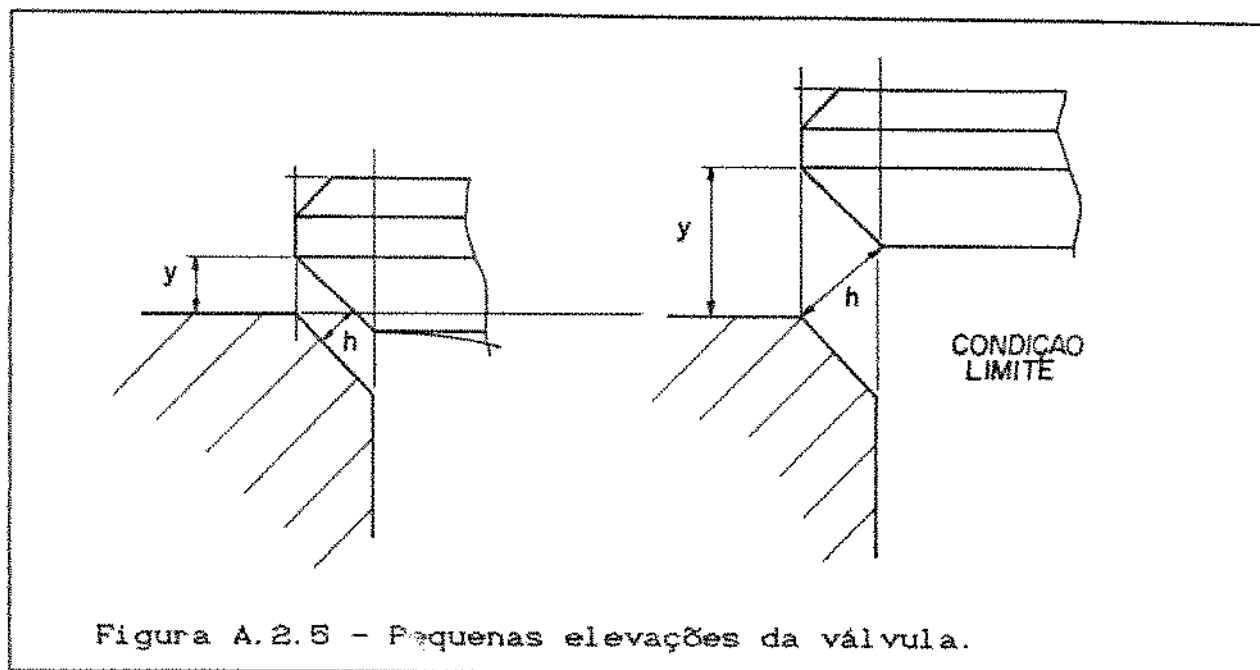
$$A_t = \pi h \left[\frac{D}{2} + \frac{(D + 2 h \cos 45^\circ)}{2} \right] \quad (A2.18)$$

como a elevação instantânea (Y) e a diretriz do cone estão relacionadas por

$$h = Y \cos 45^\circ \quad (A2.19)$$

então

$$A_t = \pi Y \cos 45^\circ \left[\frac{D}{2} + \frac{D}{2} + Y \cos 45^\circ \cos 45^\circ \right] \quad (A2.20)$$



ou

$$A_t = 2,121441 Y \left[D + Y/2 \right] \quad (A2.21)$$

A condição limite para a aplicação da equação acima pode ser vista também na Figura A.2.5. Na condição limite

$$\frac{D}{16 \cos 45} = Y \cos 45 \rightarrow Y/D = 0,125 \quad (A2.22)$$

Caso 2 - Elevações intermediárias da válvula

No caso de elevações intermediárias, a área mínima continua sendo a superfície lateral de um cone, mas agora um cone de ângulo variável, como mostrado na Figura A.2.6. Neste caso, os diâmetros são D e $(D + 2 D/16)$ e então

$$A_t = \pi h \left[D/2 + (D + 2 D/16)/2 \right] \quad (A2.23)$$

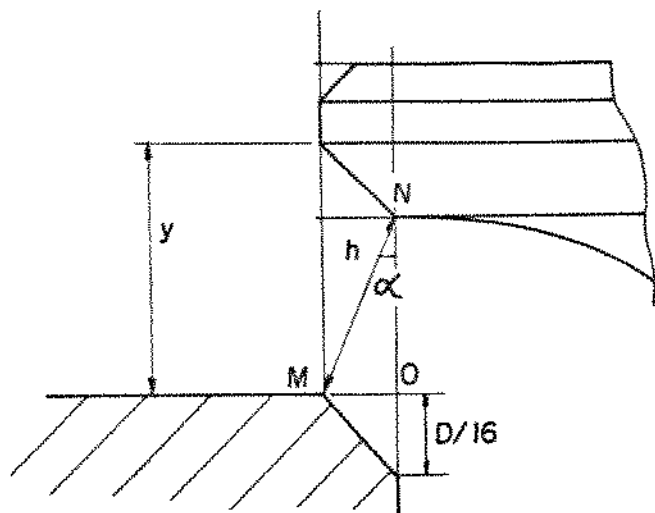


Figura A.2.6 - Elevações intermediárias da válvula.

A relação entre h e Y pode ser obtida pelo triângulo definido pelas letras $M N O$ da figura A.2.6:

$$h^2 = (Y - D/16)^2 + (D/16)^2 \quad (A2.24)$$

e então

$$A_t = \pi \left[(Y - D/16)^2 + (D/16)^2 \right]^{1/2} \left[\frac{17 D}{16} \right] \quad (A2.25)$$

que, após algumas simplificações se reduz a

$$A_t = 3,337942 D \left[Y^2 - \frac{Y D}{8} + \frac{D^2}{128} \right]^{1/2} \quad (A2.26)$$

Caso 3 Grande elevação da válvula

Este caso é caracterizado pela constância da área mínima, uma vez que agora a área limitante para o escoamento não mais está localizada no cone entre a válvula e sua sede, mas entre o

diâmetro nominal da válvula e o diâmetro de sua haste. A figura A.2.7 mostra que a área limitante é a de um anel circular.

A área mínima de escoamento nestas condições é

$$A_t = \pi D^2/4 - \pi D_s^2/4 \quad (A2.27)$$

onde D_s é o diâmetro da haste da válvula. Como, em geral D_s é um quarto de D :

$$A_t = 0,736311 D^2 \quad (A2.28)$$

A condição limite entre os Casos 2 e 3 ocorre quando

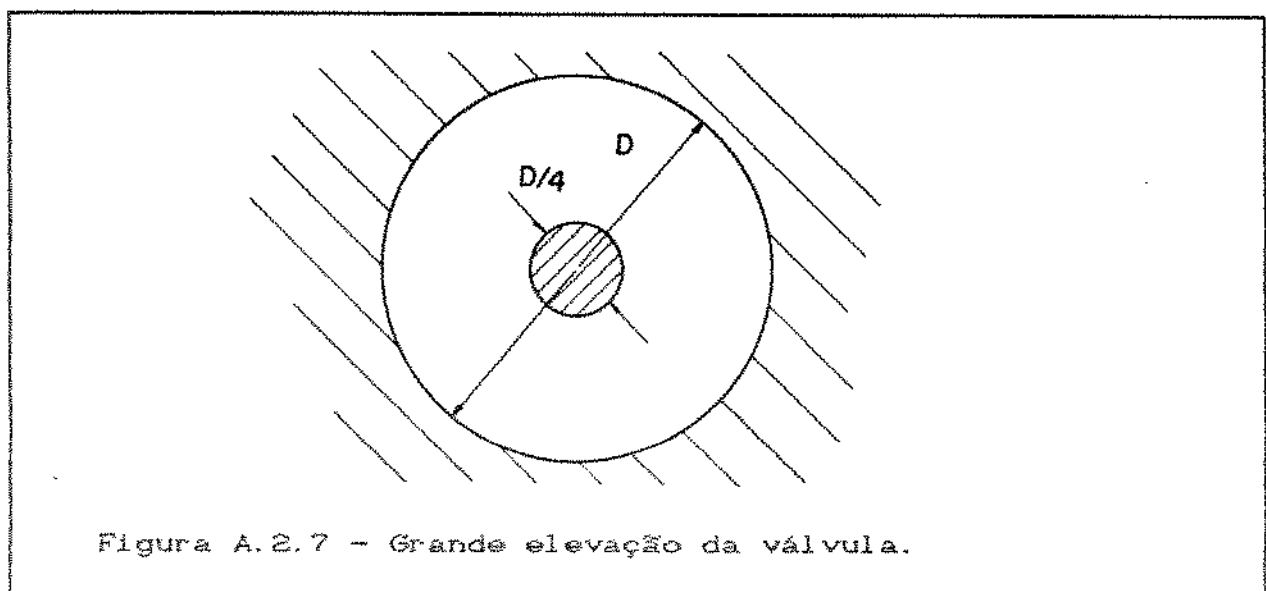
$$\left[A_t \right]_{\text{caso 2}} = \left[A_t \right]_{\text{caso 3}} \quad (A2.29)$$

ou seja

$$17 \pi D/16 \left[Y^2 - \frac{Y D}{8} + \frac{D^2}{128} \right] = \frac{15 \pi}{64} D^2 \quad (A2.30)$$

que, após alguma simplificação, fornece uma equação de segundo grau em Y/D cujas raízes são:

$$Y/D = 0,274049 \quad (A2.31)$$



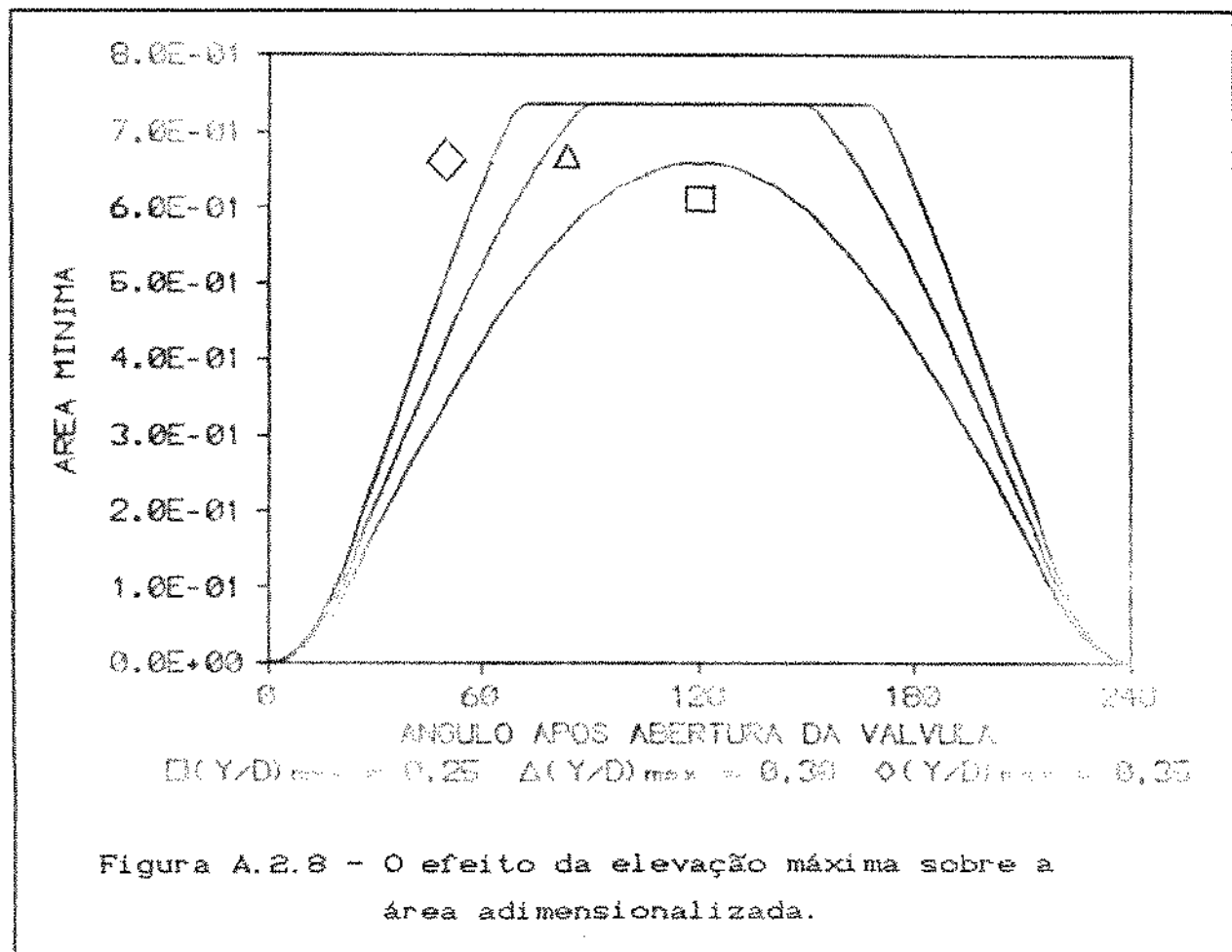
$$Y/D = -0,1490$$

(A2.32)

esta última sem significado físico. Apesar de raro nos projetos de válvulas modernos, pode acontecer que a relação entre a elevação máxima e o diâmetro nominal da válvula seja menor do que a condição limite acima e, nessa situação, o Caso 3 jamais ocorrerá.

Cumpra relembrar que os resultados aqui apresentados e empregados no modelo de simulação referem-se a uma válvula padrão tal como mostrada na figura A.2.4. Todavia, a dedução de expressões semelhantes para válvulas com outras relações geométricas é bastante simples e segue os procedimentos descritos acima.

O efeito do valor da relação $(Y/D)_{\max}$ sobre a área mínima instantânea adimensionalizada está mostrado na Figura A.2.8.



APÊNDICE 3: COEFICIENTES DE PELÍCULA INSTANTÂNEOS

O modelo de transmissão de calor instantânea empregado neste trabalho pressupõe a existência de um coeficiente de película também instantâneo. Através de uma revisão bibliográfica foram identificadas as correlações empíricas e semi-empíricas mais utilizadas. Conforme já mencionado no Capítulo 4, foram selecionadas para um estudo mais aprofundado dez correlações, que serão identificadas pelas duas letras iniciais do nome de seu proponente: de Nusselt (NU), de Brilling (BR), de Tyen (TY), de Eichelberg (EI), de Annand (AN), de Hohenberg (HO), de Sitkei (SI), de Woschni (WO), de Nishiwaki para a admissão (NA) e de Nishiwaki para a exaustão (NE).

A partir de valores típicos de pressão, temperatura e volume instantâneos, expressos em função do ângulo de manivela (θ), para um motor de combustão interna em suas diversas fases de operação, foram calculadas as dez expressões que avaliam o coeficiente de película. As correlações de Nishiwaki só foram consideradas nos processos para os quais foram desenvolvidas.

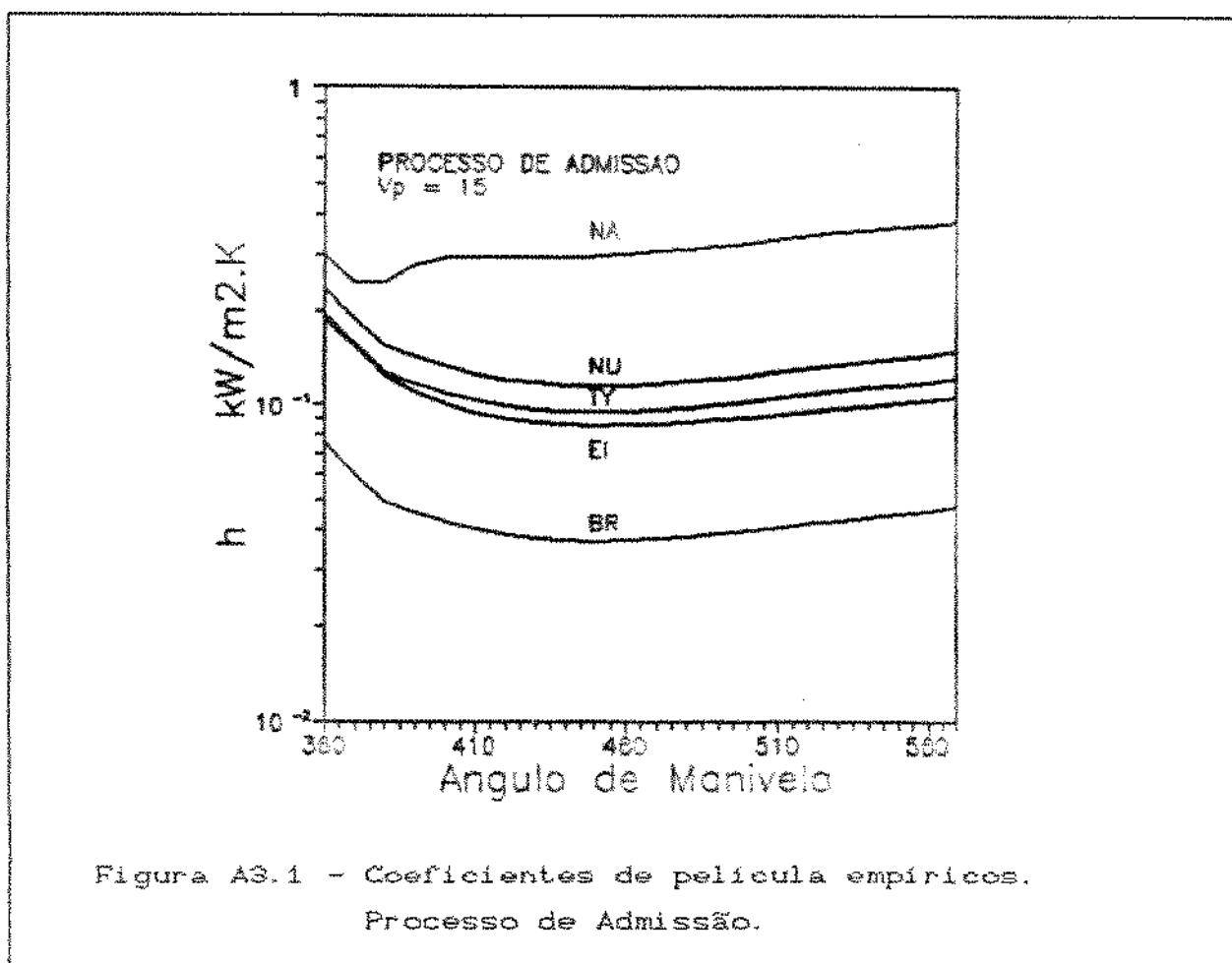
Todas as expressões de coeficientes de película devem ter suas constantes determinadas caso a caso; todavia, como não haviam dados experimentais disponíveis para um dado motor particular, as constantes foram assumidas com seus valores originais. Os resultados apresentados consideram apenas os efeitos convectivos, pois a radiação não é relevante nos motores de ignição por centelha [140].

As figuras A3.1 e A3.2 apresentam os coeficientes de película para o processo de admissão, para uma velocidade média de pistão de 15 m/s, que corresponde à faixa de rotação máxima de um motor. As únicas expressões desenvolvidas especificamente para esse processo são as de Nishiwaki (NA) e de Woschni (WO). A expressão de Annand produz resultados próximos à de Woschni. As

demais correlações produzem valores relativamente baixos.

As figuras A3.3 e A3.4 mostram os coeficientes de película ainda para o processo de admissão, porém com uma velocidade média de pistão baixa (3 m/s). As mesmas tendências são obtidas, embora a ordem decrescente de valores de coeficientes de película possa ser alterada. Assim, tomando como base as expressões de Nishiwaki e de Woschni, apenas a de Annand continua fornecendo valores próximos, embora a expressão de Eichelberg, por exemplo, passe a ser uma das que produz valores melhores entre as demais.

Nas figuras A3.5 e A3.6 podem ser vistos os resultados para o processo de compressão. Deve ser observado que a correlação de Woschni possui uma descontinuidade entre a admissão e a compressão, pois muda o valor da constante que afeta o termo dependente da velocidade média do pistão; o mesmo ocorre entre a



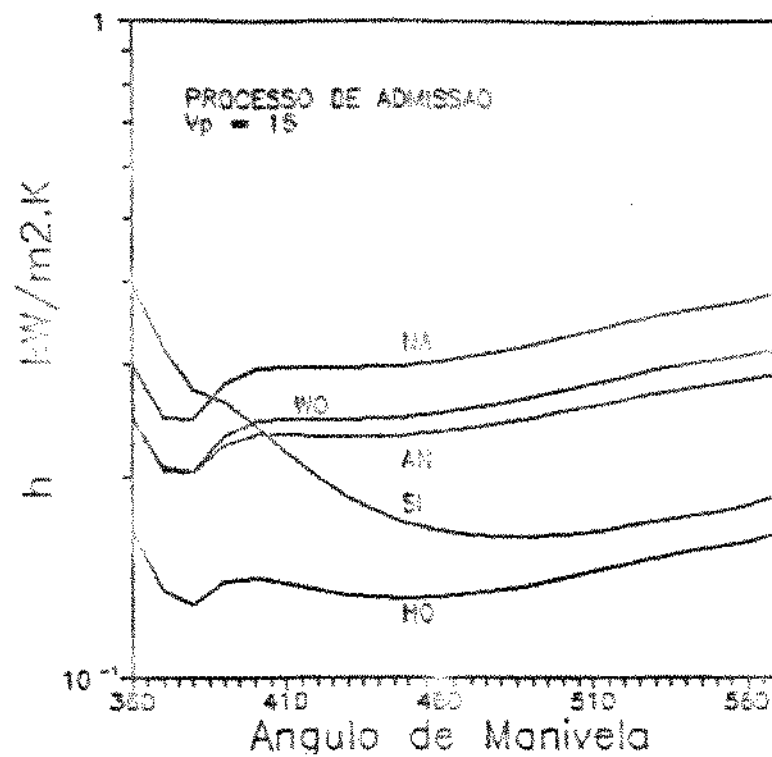


Figura A3.2 - Coeficientes de película semi-empíricos.
Processo de Admissão.

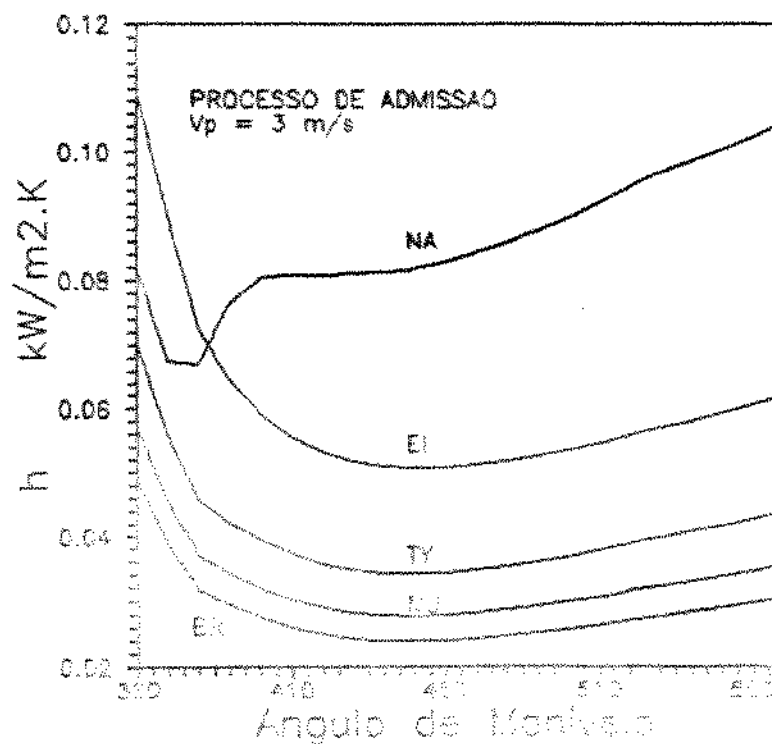


Figura A3.3 - Coeficientes de película empíricos.
Processo de Admissão.

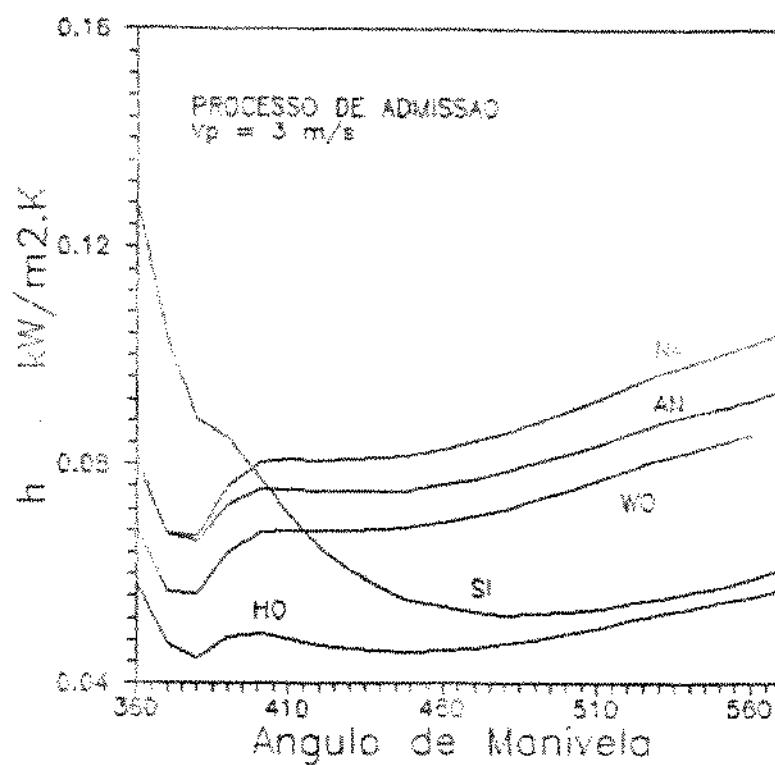


Figura A3.4 - Coeficientes de película semi-empíricos.
Processo de Admissão.

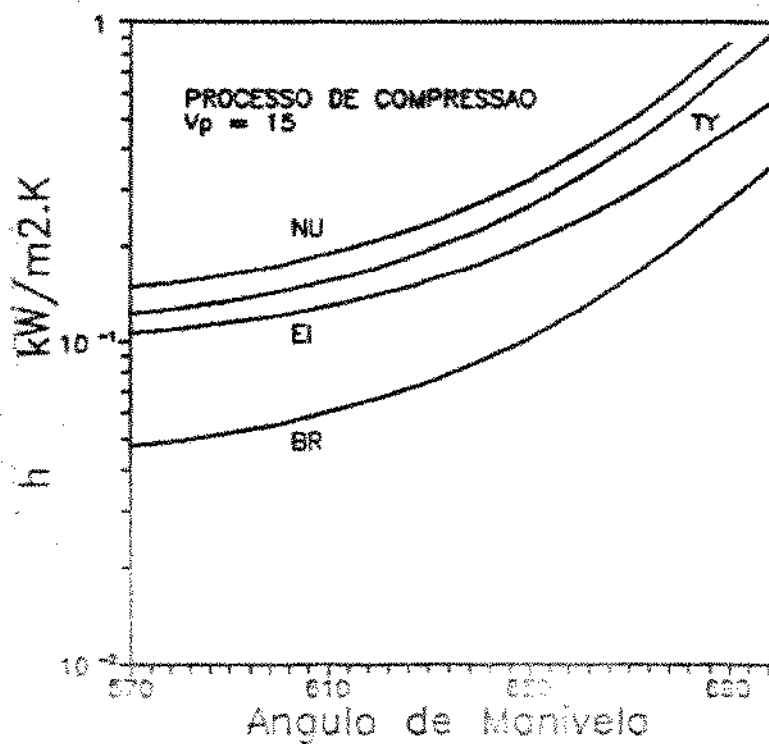
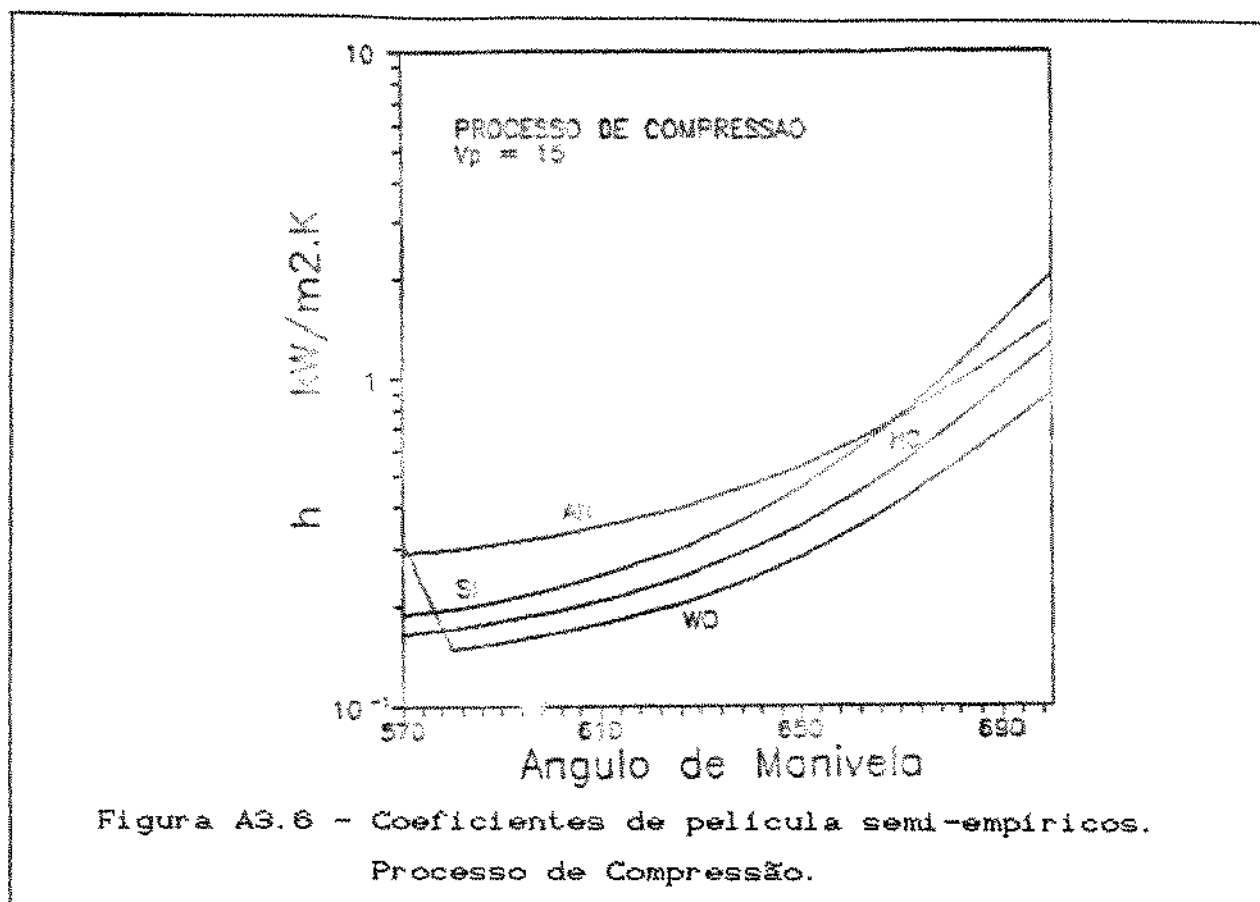


Figura A3.5 - Coeficientes de película empíricos.
Processo de Compressão.



expansão e a exaustão.

Os resultados para o processo de combustão são apresentados nas figuras A3.7 e A3.8 para a velocidade média de pistão de 15 m/s e nas figuras A3.9 e A3.10 para 3 m/s. As correlações que apresentam um coeficiente de película que aumenta com a temperatura possuem grande inclinação nas proximidades do ponto morto superior. Inversamente, as correlações semi-empíricas variam menos pelo mesmo motivo. A grande variação na correlação de Woschni é devida ao termo de velocidade associado à combustão. O mesmo ocorre com a correlação de Sitkei, mas devido à relação volume instantâneo - área.

No caso em que a velocidade média de pistão é baixa, as correlações que são menos afetadas pelo efeito de redução da turbulência passam a apresentar coeficientes de película maiores do que as demais; é o caso das correlações de Eichelberg e de Tyen, que para velocidades médias de pistão pequenas passam a ser maiores do que a de Nusselt.

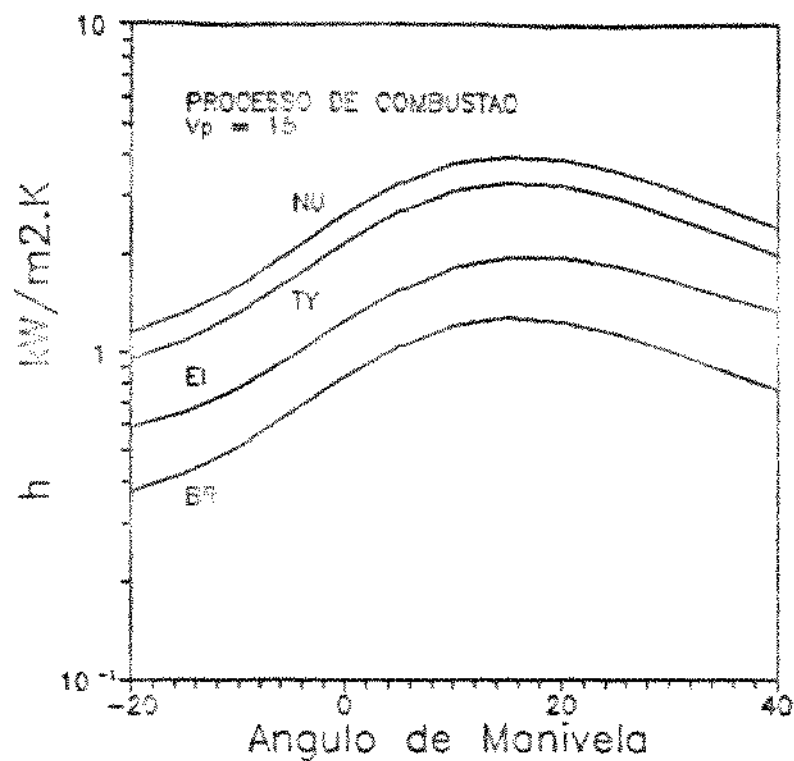


Figura A3.7 - Coeficientes de película empíricos.
Processo de Combustão.

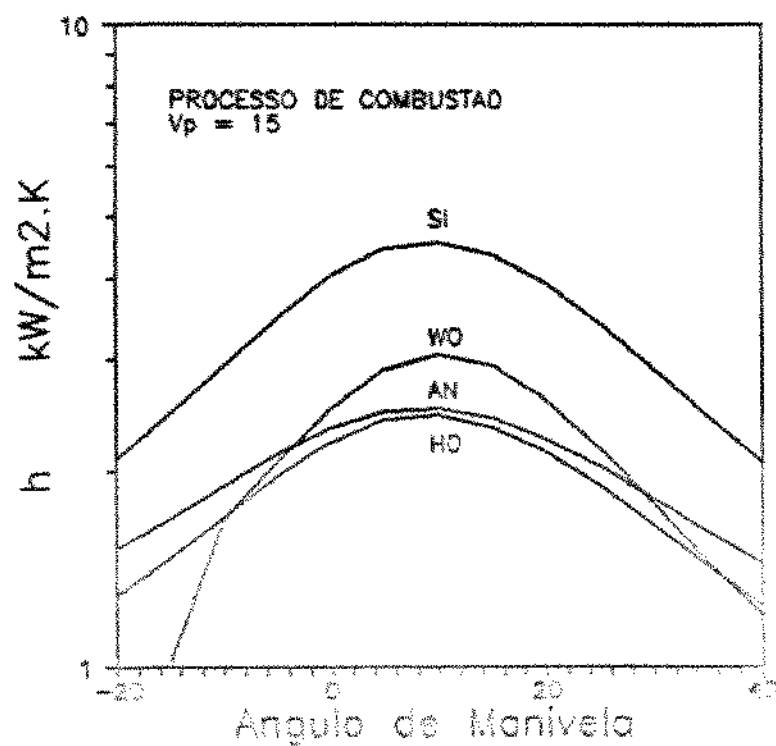


Figura A3.8 - Coeficientes de película semi-empíricos.
Processo de Combustão.

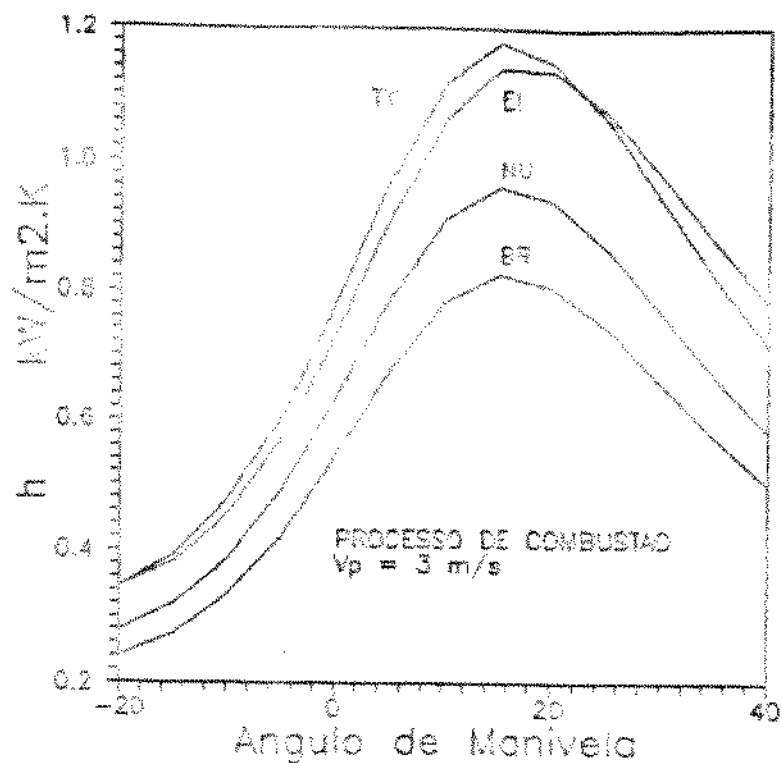


Figura A3.9 - Coeficientes de película empíricos.
Processo de Combustão.

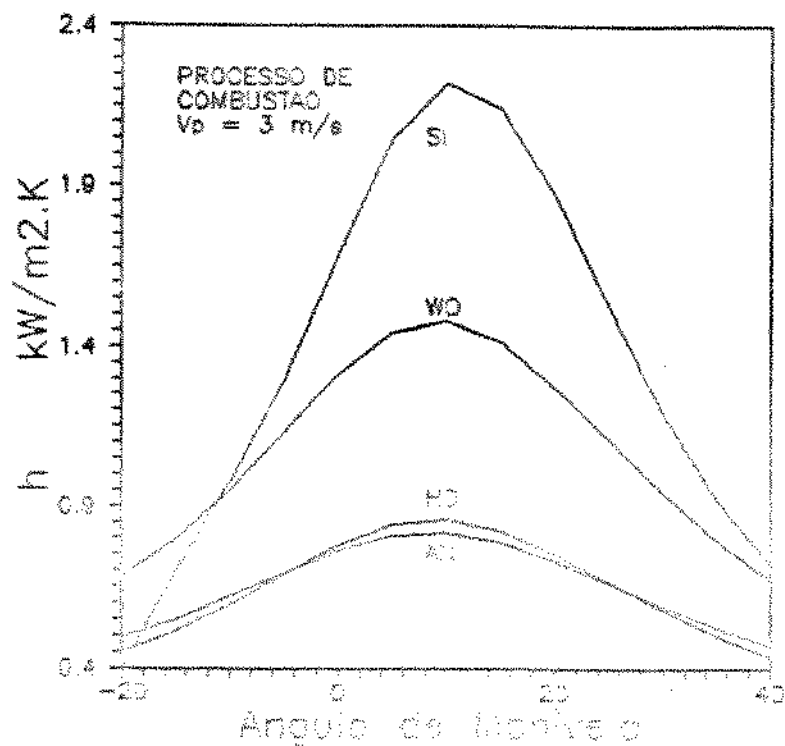
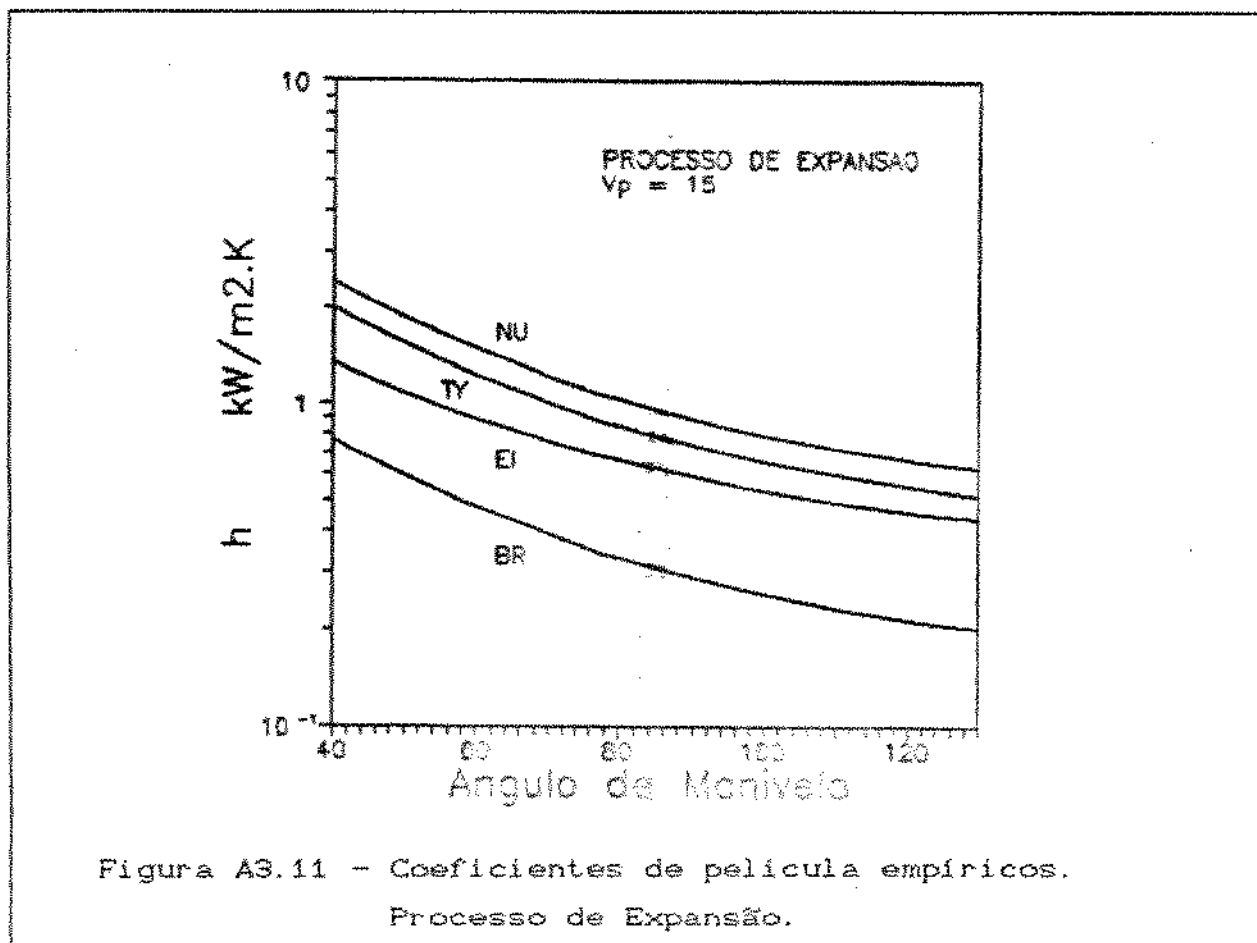


Figura A3.10 - Coeficientes de película semi-empíricos.
Processo de Combustão.

No processo de expansão, mostrado nas figuras A3.11 e A3.12, as mesmas tendências discutidas na compressão se manifestam. Cabe ressaltar a queda abrupta na correlação de Woschni, que privilegia de forma excessiva a turbulência induzida pela combustão, bem como os bons valores obtidos com a expressão de Eichelberg - ao contrário dos processos anteriores.

Os resultados para o processo de exaustão são indicados nas figuras A3.13 e A3.14. As únicas expressões desenvolvidas especificamente para este processo são as de Nishiwaki e de Woschni; todavia, os valores obtidos pelas correlações de Annand e de Eichelberg (para baixas velocidades médias de pistão) são comparáveis.

Na tabela 4.1 do Capítulo 4, o efeito de cada grandeza (pressão, temperatura, dimensão característica e nível de turbulência) é mostrado de forma analítica. As figuras A3.15 a A3.22 mostram o mesmo de forma gráfica, a partir de um mesmo caso base utilizado



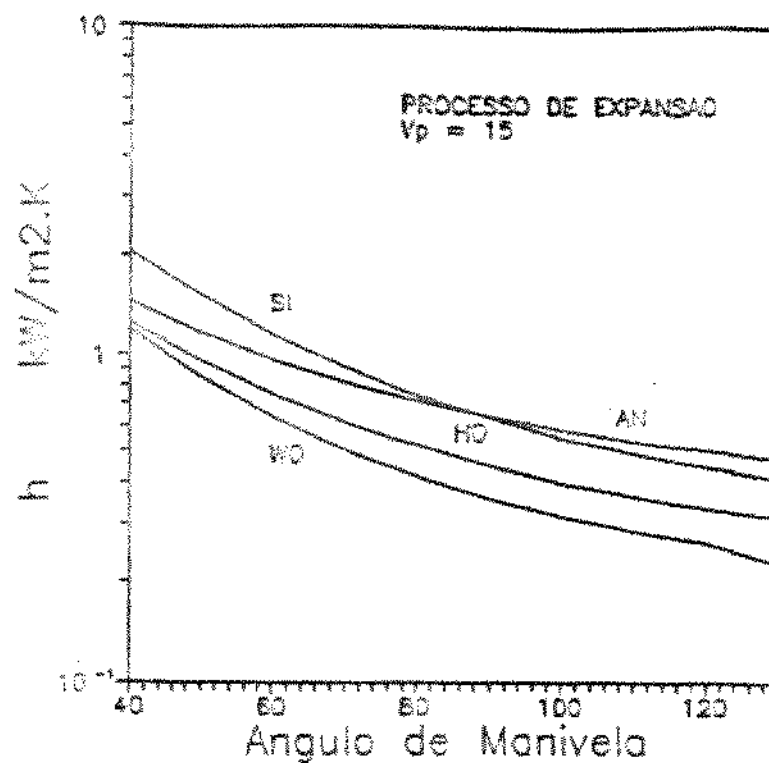


Figura A3.12 - Coeficientes de película semi-empíricos.
Processo de Expansão.

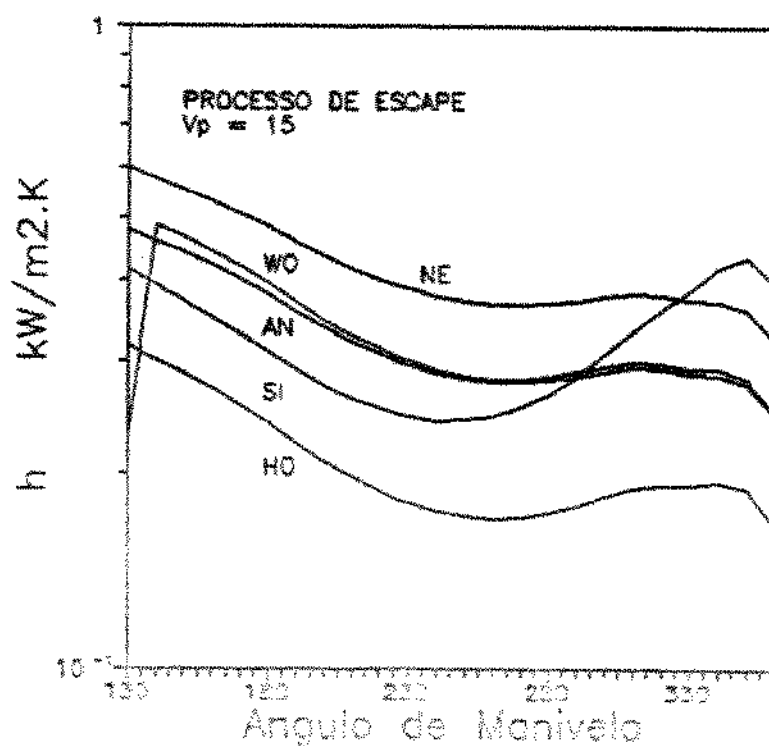
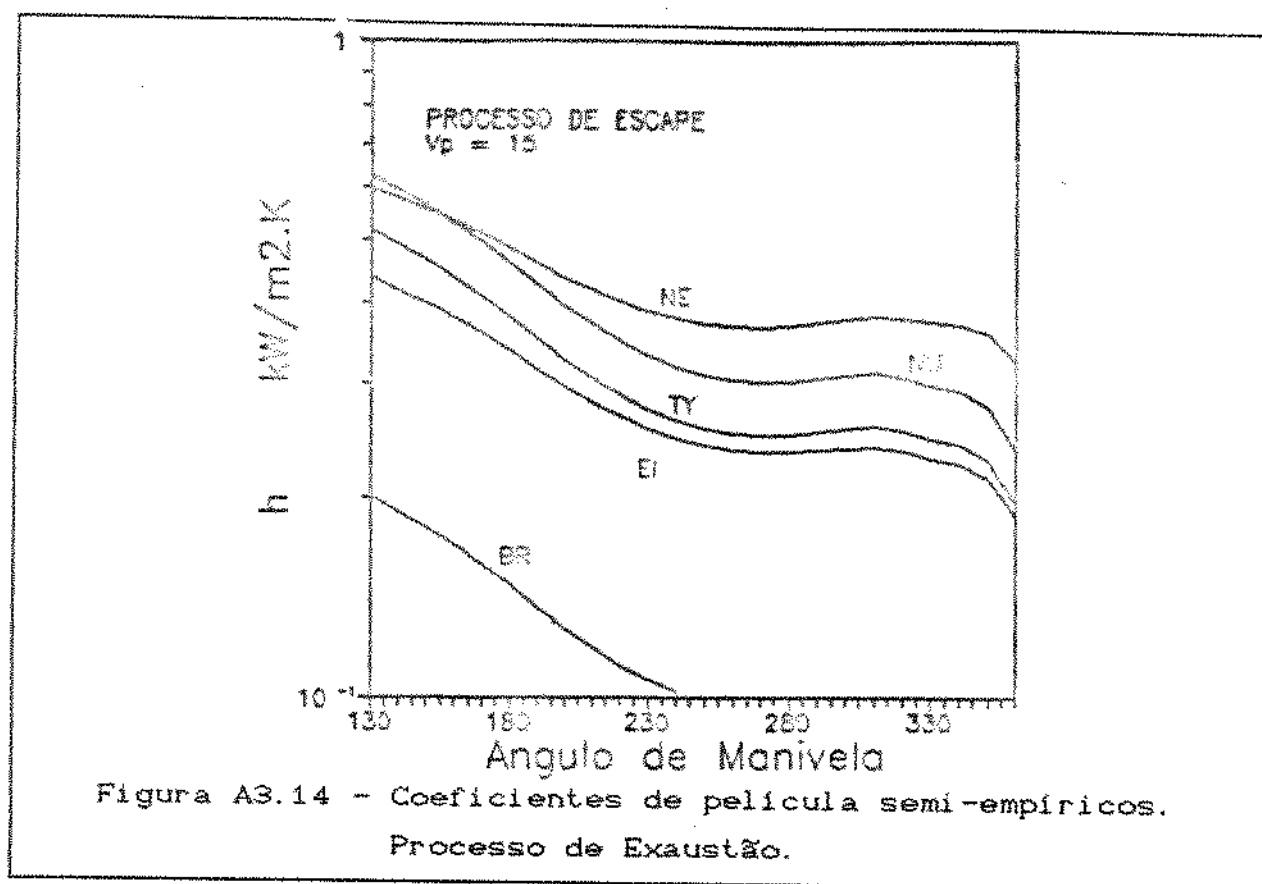


Figura A3.13 - Coeficientes de película empíricos.
Processo de Exaustão.



para adimensionalizar os resultados. Nas figuras A3.15 e A3.16 e A3.17 e A3.18 são mostrados os efeitos relativos de mudanças na pressão e na temperatura, respectivamente; deve ser notado que há correlações que aumentam com o aumento de temperatura (empíricas) ou que diminuem com o aumento de temperatura (semi-empíricas). Nas figuras seguintes, A3.19 e A3.20, são mostrados os efeitos da intensidade de turbulência, através de mudanças na velocidade média do pistão. Para a correlação de Woschni, a velocidade média do pistão representa apenas uma parte do efeito de turbulência, uma vez que esta correlação busca considerar também a turbulência induzida pela combustão. Finalmente, nas figuras A3.21 e A3.22 são indicados os efeitos da dimensão característica sobre os coeficientes de película. Note-se que as correlações empíricas (NU, BR, TY e EI) não possuem qualquer dependência com as dimensões do motor, o que não é razoável. A correlação de Sitkei não passa pelo ponto (1,1) adimensional do gráfico, pois não usa o diâmetro do motor como parâmetro de dimensão e sim a relação entre o volume e a área instantâneos.

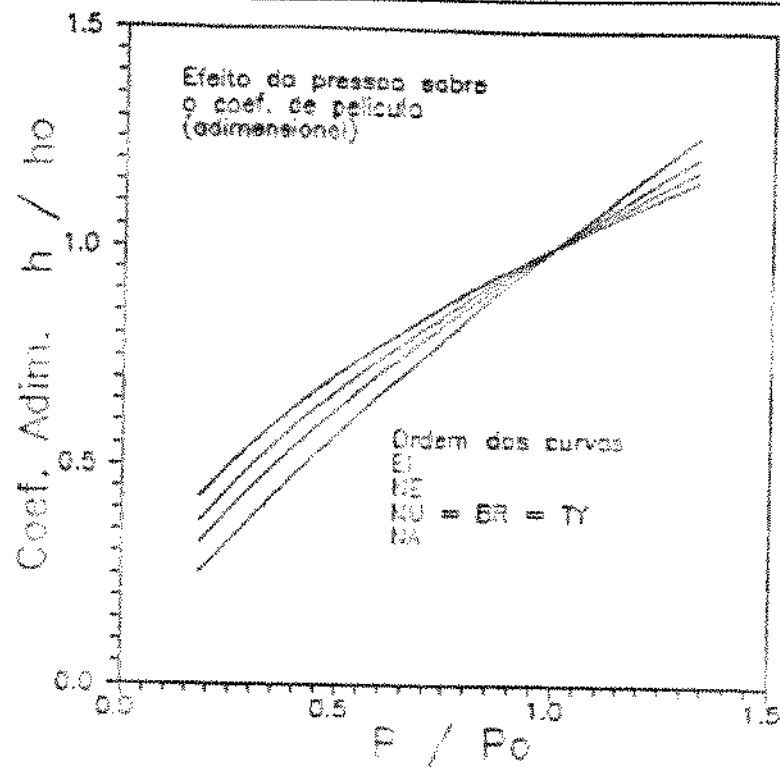


Figura A3.15 - Coeficientes de película empíricos.
Efeito da Pressão.

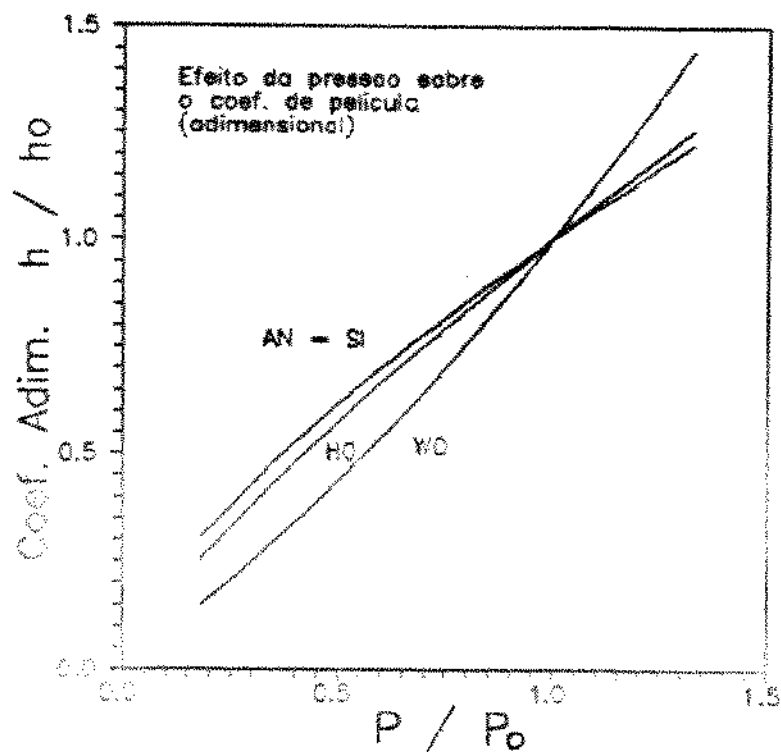


Figura A3.16 - Coeficientes de película semi-empíricos.
Efeito da Pressão.

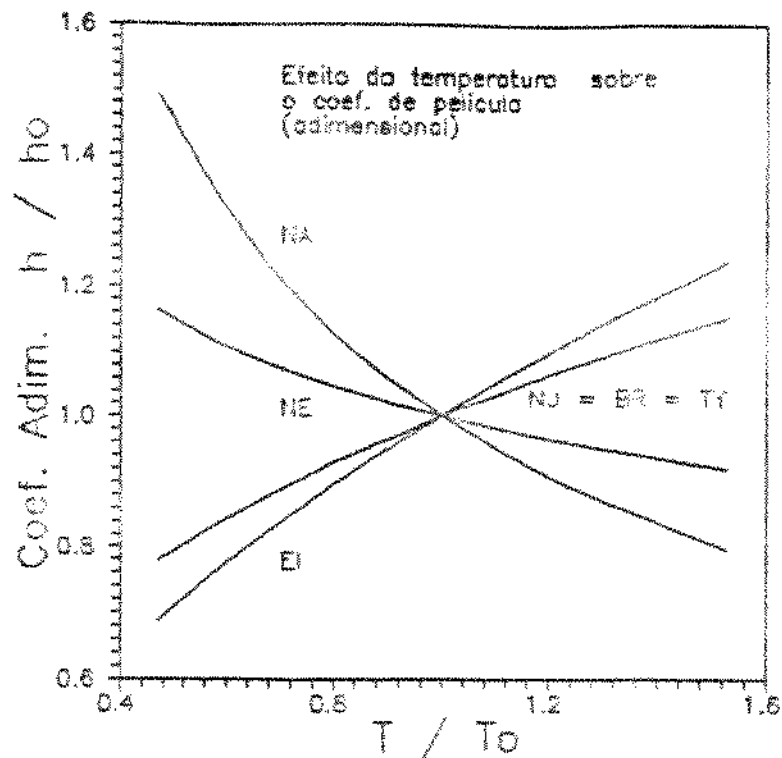


Figura A3.17 - Coeficientes de película empíricos.
Efeito da Temperatura.

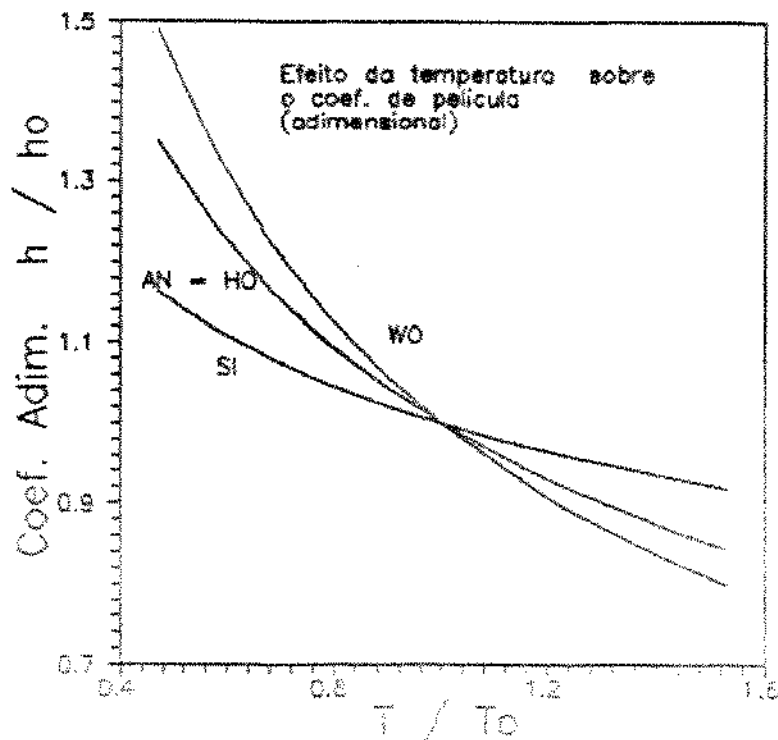


Figura A3.18 - Coeficientes de película semi-empíricos.
Efeito da Temperatura.

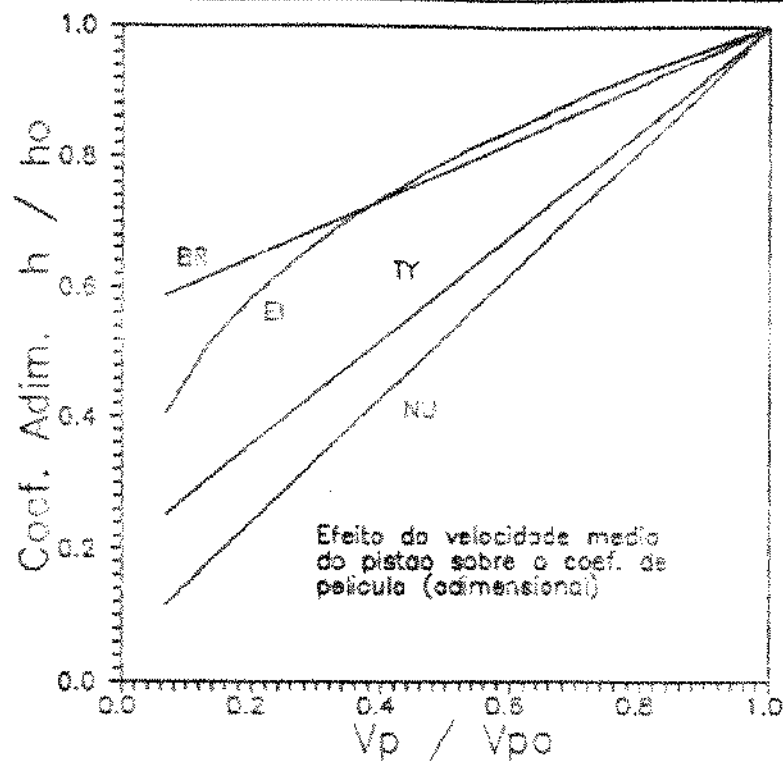


Figura A3.10 - Coeficientes de película empíricos.

Efeito da Velocidade média do pistão.

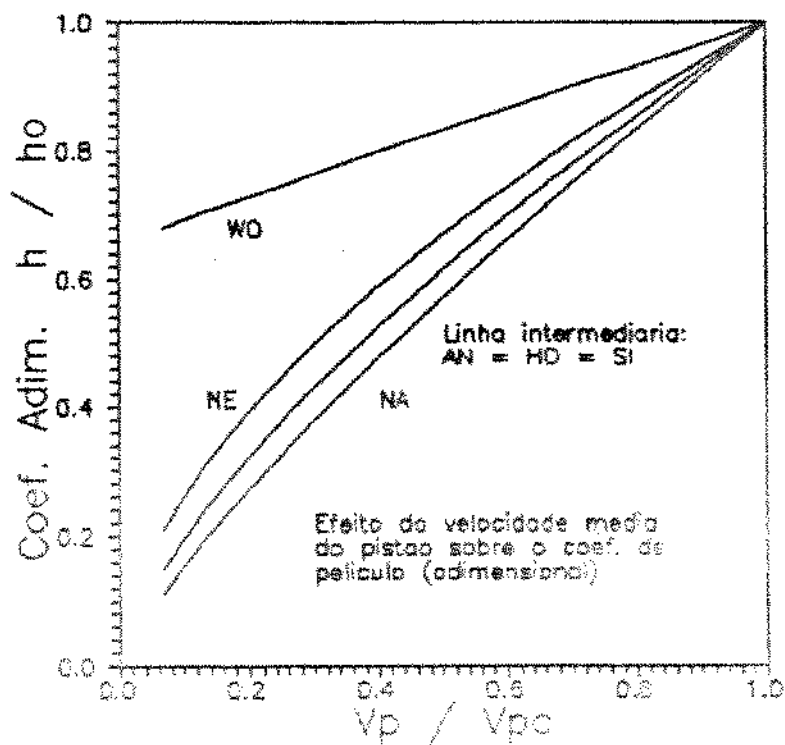


Figura A3.20 - Coeficientes de película semi-empíricos.

Efeito da Velocidade média do pistão.

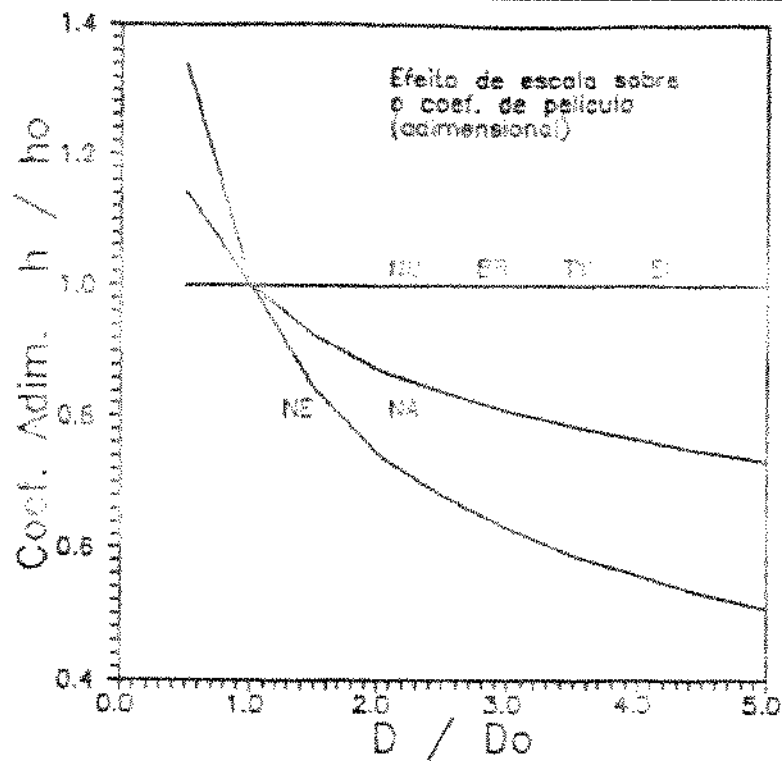


Figura A3.21 - Coeficientes de película empíricos.
Efeito da Dimensão característica.

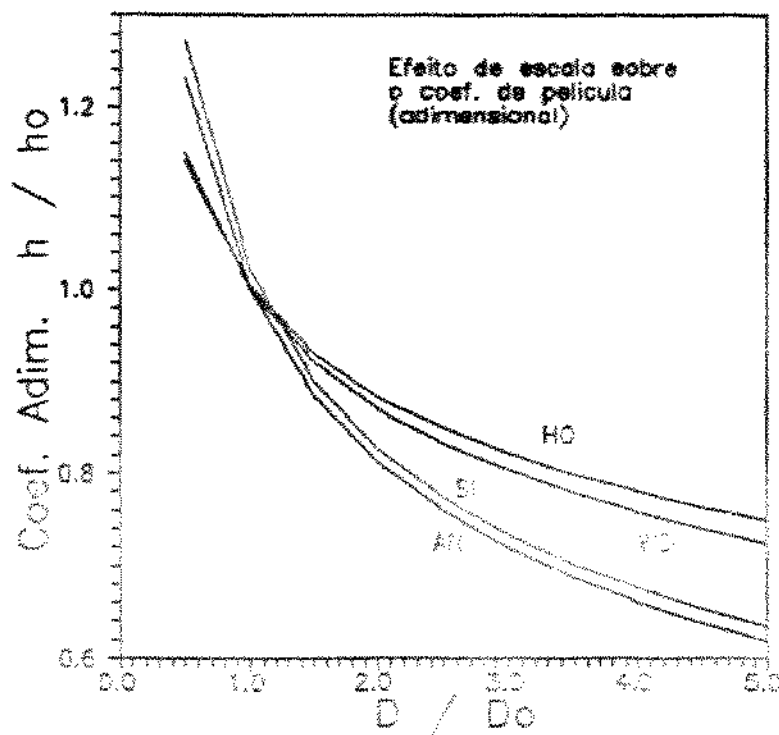


Figura A3.22 - Coeficientes de película semi-empíricos.
Efeito da Dimensão característica.

APÊNDICE 4: A FUNÇÃO DE WIEBE

A função de Wiebe é uma forma conveniente de atribuir um perfil para a liberação de calor na combustão. Como já foi mencionado no Capítulo 4, a expressão de Wiebe foi obtida a partir de noções básicas da teoria de reações em cadeia e tem sido bastante empregada para motores de ignição por centelha e até para motores de ignição por compressão.

Como já foi visto na Figura 4.5, que é novamente reproduzida na Figura A4.1, para uma mesma duração e início da combustão, a função de Wiebe pode ter sua forma bastante modificada através do parâmetro de velocidade de queima ($m+1$). Na figura A4.1, as curvas indicadas por AS, BL, CO, W3 e W5 correspondem, respectivamente às expressões (4.33) proposta por Asmus *et alii* [112], (4.34) proposta por Blair [160], (4.35) - que representa um perfil senoidal, como indicado em [161] - e duas funções de Wiebe com ($m+1$) igual a 3 e a 5, tal como na equação (4.36).

A forma integral das expressões que originaram a Figura A4.1, mostrada na Figura A4.2, indica que, apesar das expressões serem bastante diferentes em sua forma diferencial, há uma suavização que as torna mais próximas quando em sua forma integral.

A função de Wiebe, em sua forma integral, é dada por:

$$X = 1 - \exp \left[-a \left(\frac{\theta - \theta_f}{\Delta\theta_b} \right)^{m+1} \right] \quad (A4.1)$$

O chamado parâmetro de eficiência da combustão da função de Wiebe (a) normalmente possui o valor 6,9078, que corresponde a um valor de X de 0,999 quando $(\theta - \theta_f)$ é igual a $\Delta\theta_b$. Isto signifi-

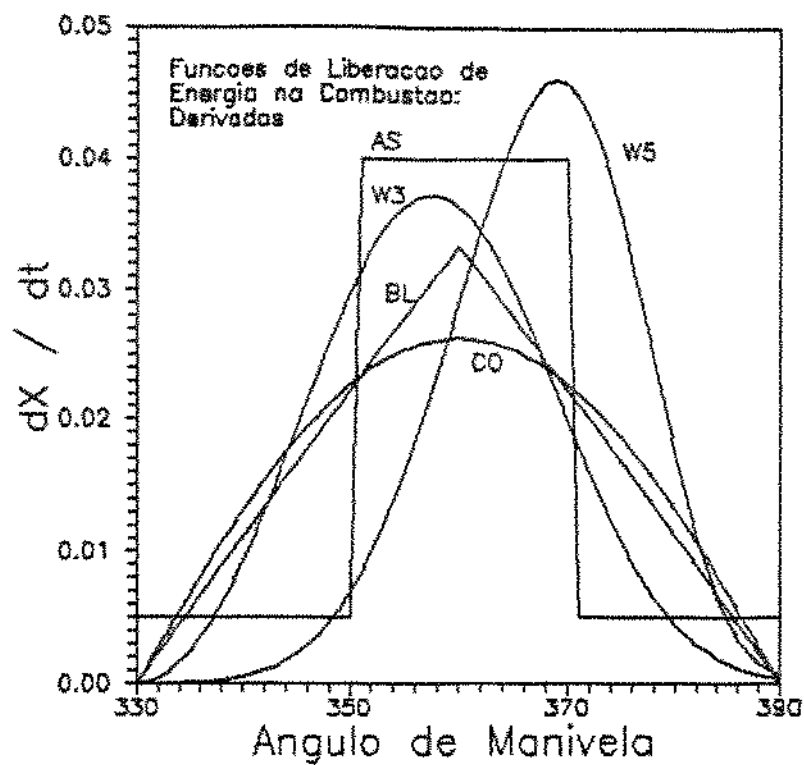


Figura A4.1 - Perfis de taxa de liberação de energia.

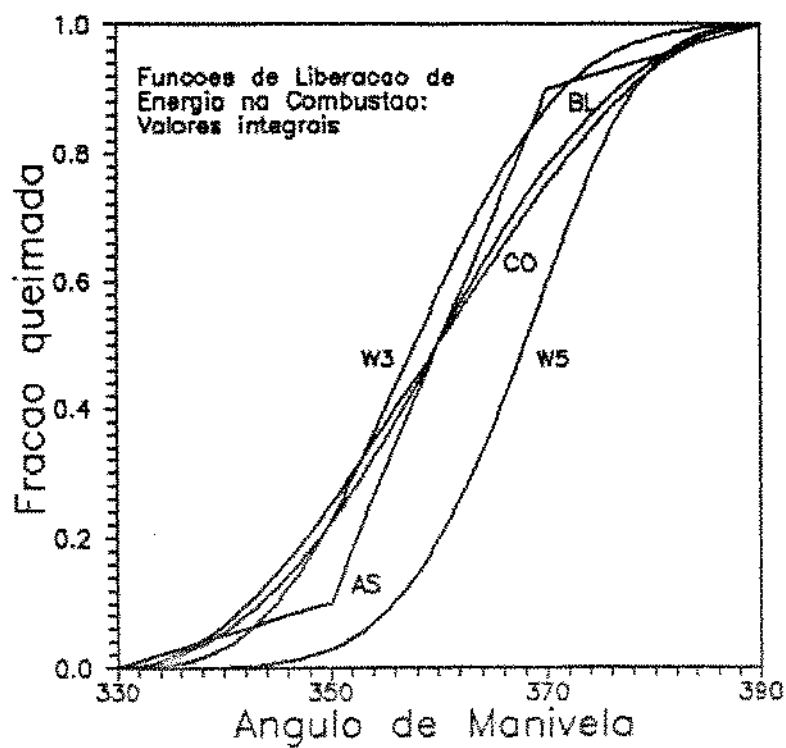


Figura A4.2 - A forma integral dos perfis da Fig. A4.1.

ca assumir que a combustão efetivamente se encerra quando se vence o período angular correspondente ao parâmetro de duração da combustão ($\Delta\theta_b$).

Uma vez que a fração de massa queimada X tende assintoticamente para a unidade, é possível desvincular o final da combustão do intervalo angular definido como parâmetro de duração desde que se mude o valor da constante (a). A figura A4.3 mostra o efeito do parâmetro de eficiência sobre a fração de massa de combustível que já queimou (X), para um parâmetro de duração de 60° , o início da combustão a 330° e um fator de forma ($m+1$) igual a 3. Na figura citada, as curvas assinaladas como A, B, C, D e E correspondem, respectivamente, a valores de (a) de 1, 3, 5, 6,9078 e 9. Quando $(\theta - \theta_i)$ é igual a $\Delta\theta_b$ - que ocorre para 390° neste caso particular - as frações de massa queimada para as curvas A, B, C, D e E são, respectivamente, 0,632121, 0,950213, 0,993262, 0,9990 e 0,999877.

O efeito do parâmetro de duração $\Delta\theta_b$ é mostrado através da Figura A4.4. Neste caso, o parâmetro de eficiência (a) e o fator de forma ($m+1$) foram mantidos constantes em 6,9078 e 3. As diferentes curvas estão identificadas pelo valor do parâmetro de duração em graus. Uma vez que a figura cobre 60° após o início da combustão, as curvas que correspondem a valores de $\Delta\theta_b$ menores que 60 já alcançaram o valor de X unitário, e as de valores maiores ainda não atingiram os 99,9% de massa queimada. As curvas que correspondem a $\Delta\theta_b$ 80 e 100 graus indicam respectivamente 0,9456 e 0,7747 para a fração de massa queimada X .

Para um valores constantes dos parâmetros de eficiência e de duração, a forma da curva de liberação de energia pela combustão pode ser variada através do fator de forma ($m+1$). Nas Figuras A4.1 são indicados dois valores de ($m+1$): 3 e 5. Na Figura A4.5, o efeito do fator de forma é explorado: são apresentadas as curvas para ($m+1$) de 1 a 5, com valores de $\Delta\theta_b$ e (a) fixos em 60° e 6,9078. Deve ser notado que à medida que o fator de forma aumenta, a combustão é cada vez mais lenta no princípio e mais rápida no final. O fator de forma é também chamado de parâmetro de velocidade de queima.

Como já mencionado, a função de Wiebe pode ser ajustada em

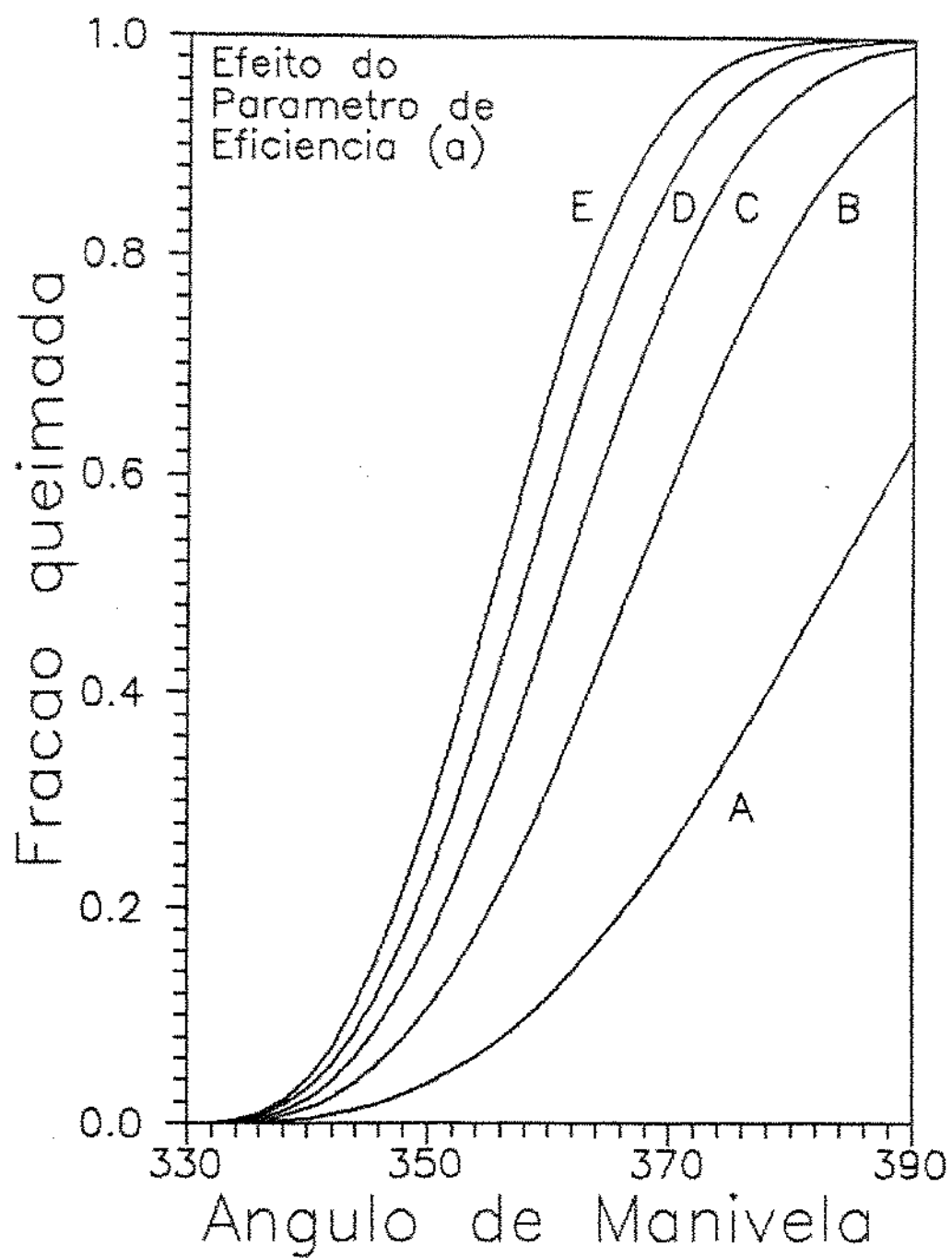


Figura A4.3 - O efeito do parâmetro de eficiência.

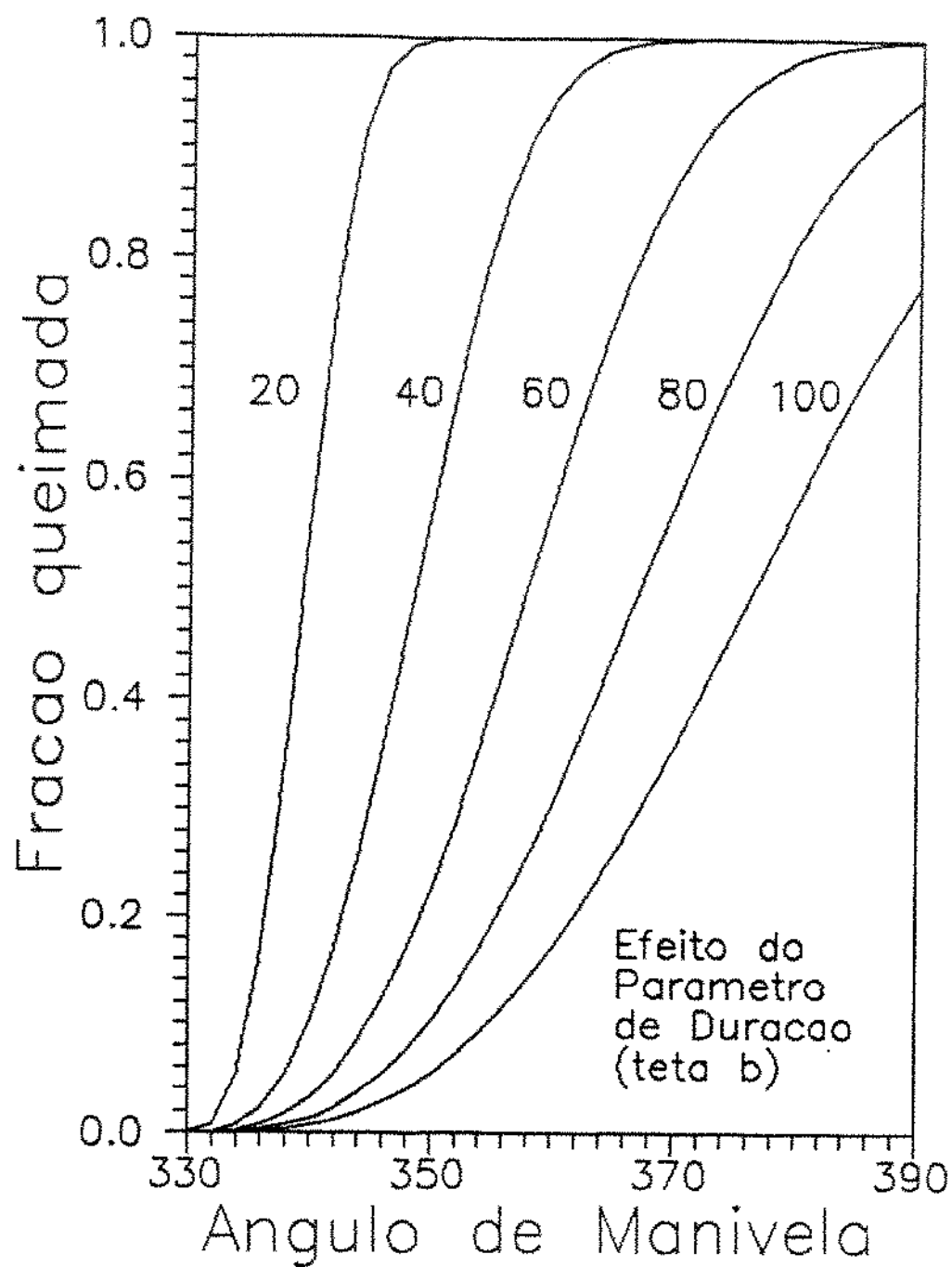


Figura A4.4 - O efeito do parâmetro de duração.

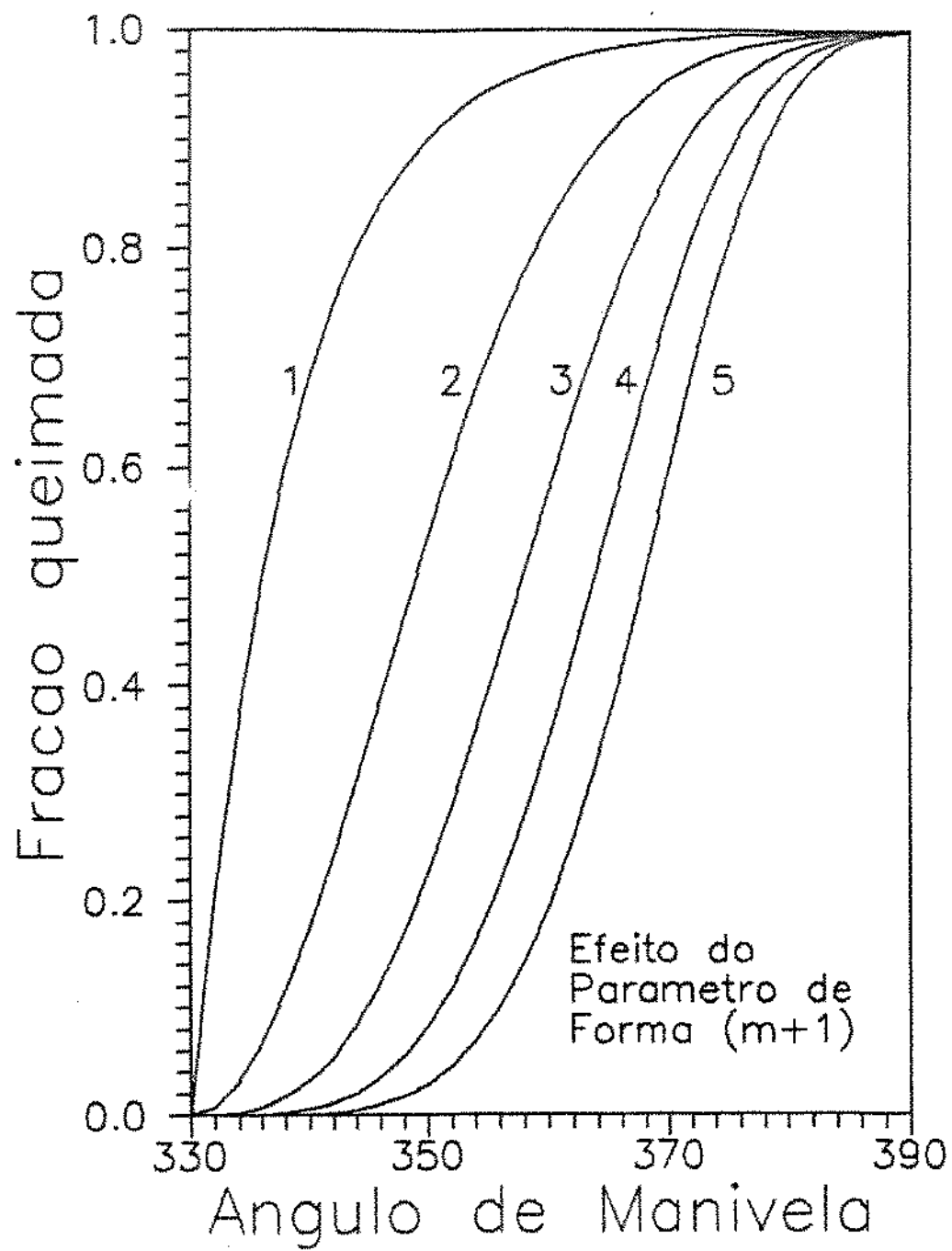


Figura A4.5 - O efeito do fator de forma.

seus parâmetros a fim de se obter a curva de liberação de energia pela combustão que reproduza um diagrama indicador (pressão versus volume instantâneos) medido. Em geral, esse ajuste é feito através dos parâmetros de duração, do início da combustão (θ_f) e do fator de forma.

APÊNDICE 5: FLUXOGRAMAS DOS PROGRAMAS

O programa principal e as cinco sub-rotinas que o complementam são mostrados aqui através de fluxogramas simplificados que apresentam os principais passos e cálculos efetuados. Não são indicadas as equações empregadas, uma vez que estas já foram apresentadas no corpo deste trabalho. Também são omitidos detalhes relativos a procedimentos numéricos para assegurar a convergência das grandezas cujo valor inicial foi estimado.

O primeiro fluxograma dá uma visão global do Programa Principal. A variável de controle é a fração de gás residual, que é dada inicialmente com um valor tentativo. O número global de iterações em f varia entre 3 e 6, dependendo do caso que está sendo analisado.

O fluxograma denominado Cálculos Preliminares corresponde à fase do programa principal onde são lidos os dados e preparadas algumas variáveis importantes que dependem exclusivamente dos dados, tais como a massa molecular (m) aparente do ar úmido, o coeficiente de ar teórico associado à proporção ar-combustível em base úmida, etc.

O processo de compressão e o processo de expansão possuem basicamente a mesma lógica, como pode ser visto nos fluxogramas "Compressão" e "Expansão", embora a sub-rotina de cálculo de propriedades no primeiro caso opere com a mistura ar - combustível - resíduos (u) e com produtos de combustão no segundo caso (b). Deve-se observar que neste trabalho o termo Compressão significa a parte fechada do ciclo antes do início da combustão e, analogamente, Expansão é a parte do ciclo após o final da combustão e que antecede a abertura da válvula de escape. A partir dessa definição, o início da combustão ocorre com o pistão ainda no curso ascendente e o final da combustão ocorre com o volume do

cilindro já aumentando. Da mesma forma, o início do processo de exaustão ainda ocorre durante a expansão dos gases mas não faz parte da Expansão e sim da Fase Aberta.

O fluxograma da Combustão, que ocupa oito páginas, mostra as seis etapas da combustão já descritas no Capítulo 4 , bem como os procedimentos para a primeira e para a última fração de massa a queimar e os cálculos após cada passo e ao final do processo.

A fase aberta do ciclo corresponde aos processos de exaustão e admissão. Como, em geral, ocorre uma superposição dos processos devido ao cruzamento de válvulas, o fluxograma da Fase Aberta deve ser único. Na maior parte do tempo durante a exaustão, apenas a válvula de escape está aberta e o programa salta a parte correspondente à válvula de admissão. Inversamente, durante a admissão o programa salta a parte correspondente à válvula de escape. Durante o período de cruzamento de válvulas, porém, ambas as válvulas estão parcialmente abertas e ocorre escoamento de gases pelas duas. O fluxograma mostra ainda a possibilidade de ocorrência de escoamento reverso em ambas as válvulas: retorno de gases queimados para dentro do cilindro através da válvula de escape e retorno de gases do cilindro para o coletor de admissão.

A sub-rotina PROP gerencia o cálculo de propriedades termodinâmicas, segundo os diferentes tipos de mistura (ar, ar-combustível, ar combustível e resíduos, produtos de combustão, etc.) e segundo as propriedades independentes (temperatura e pressão ou temperatura e volume), pelo uso da variável IC que define o caso requerido. Após a determinação do tipo de mistura e sua composição, as propriedades termodinâmicas da mistura são calculadas: energia interna, entalpia, entropia, exergia, massa molecular aparente, calores específicos a pressão e a volume constantes e sua relação, tanto extensivas como em base molar.

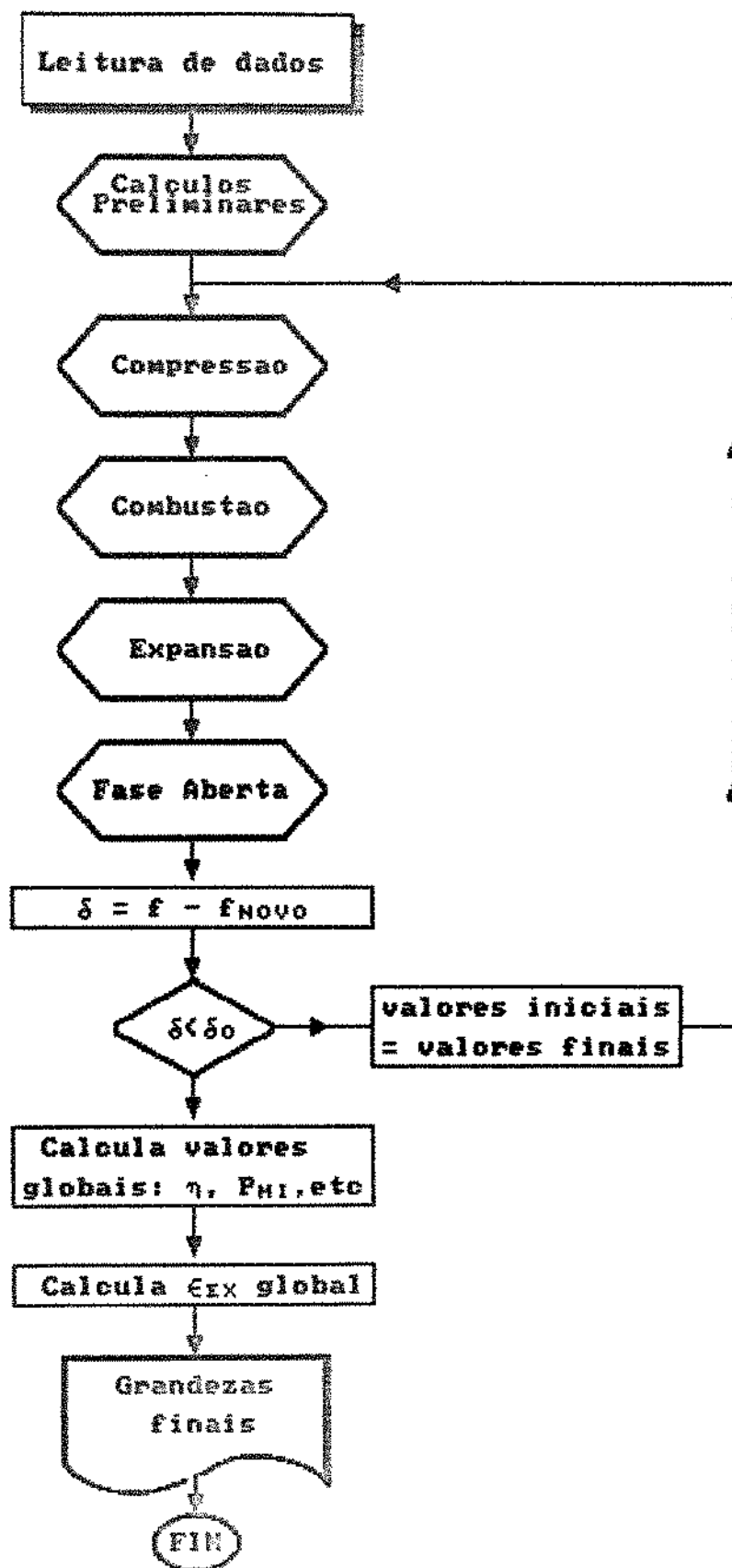
As frações molares dos gases que compõem uma dada mistura, acima de 700 K, são obtidas através das subrotinas COMTV e COMTP. Esses procedimentos de cálculo assumem o equilíbrio químico entre as espécies, consideram a presença de doze substâncias e empregam como valor inicial apenas o número de moles de Oxigênio. A diferença entre as duas sub-rotinas reside em quais são as propriedades independentes a considerar: temperatura e volume (COMTV) ou

temperatura e pressão (COMTP). Esta última sub-rotina é, na verdade, uma extensão da primeira: quando se obteve a composição da mistura para uma dada condição de temperatura e volume, é verificado se a pressão corresponde ao valor especificado. Em caso negativo, um novo valor tentativo para o volume é assumido.

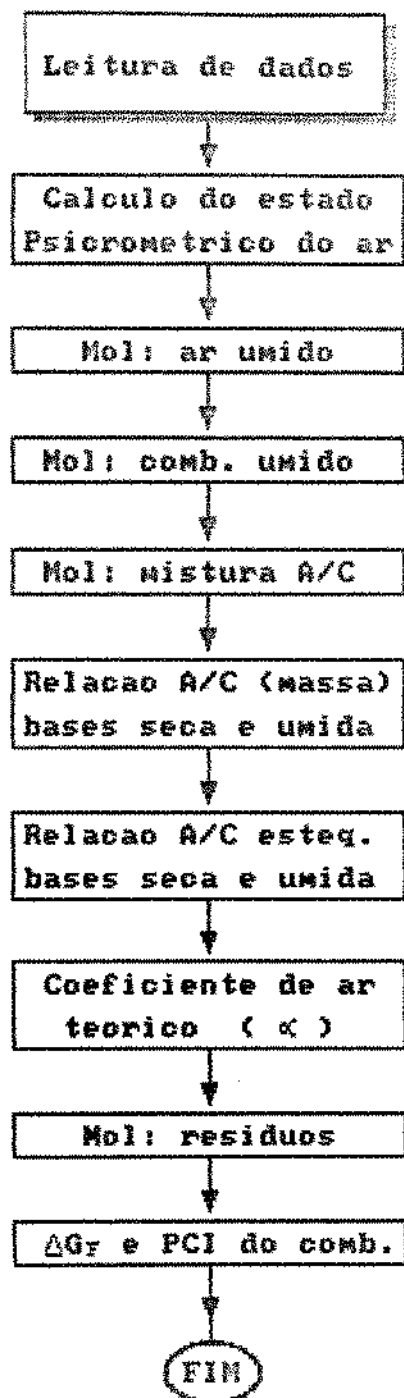
A sub-rotina TC determina o coeficiente de película adequado a cada situação (fase fechada, escape ou admissão) e, através da área de troca de calor instantânea e das diferenças de temperatura entre o gás e as paredes, calcula a taxa de transmissão de calor e a quantidade de calor transmitida durante um dado intervalo de tempo.

A sub-rotina VALV define o tipo de válvula (admissão ou escape), suas características geométricas, se ocorre escoamento reverso ou não, e então determina a elevação instantânea da válvula, o coeficiente de descarga, a área mínima do escoamento, o fluxo de massa pela válvula e a quantidade de massa que a atravessa em um dado intervalo de tempo.

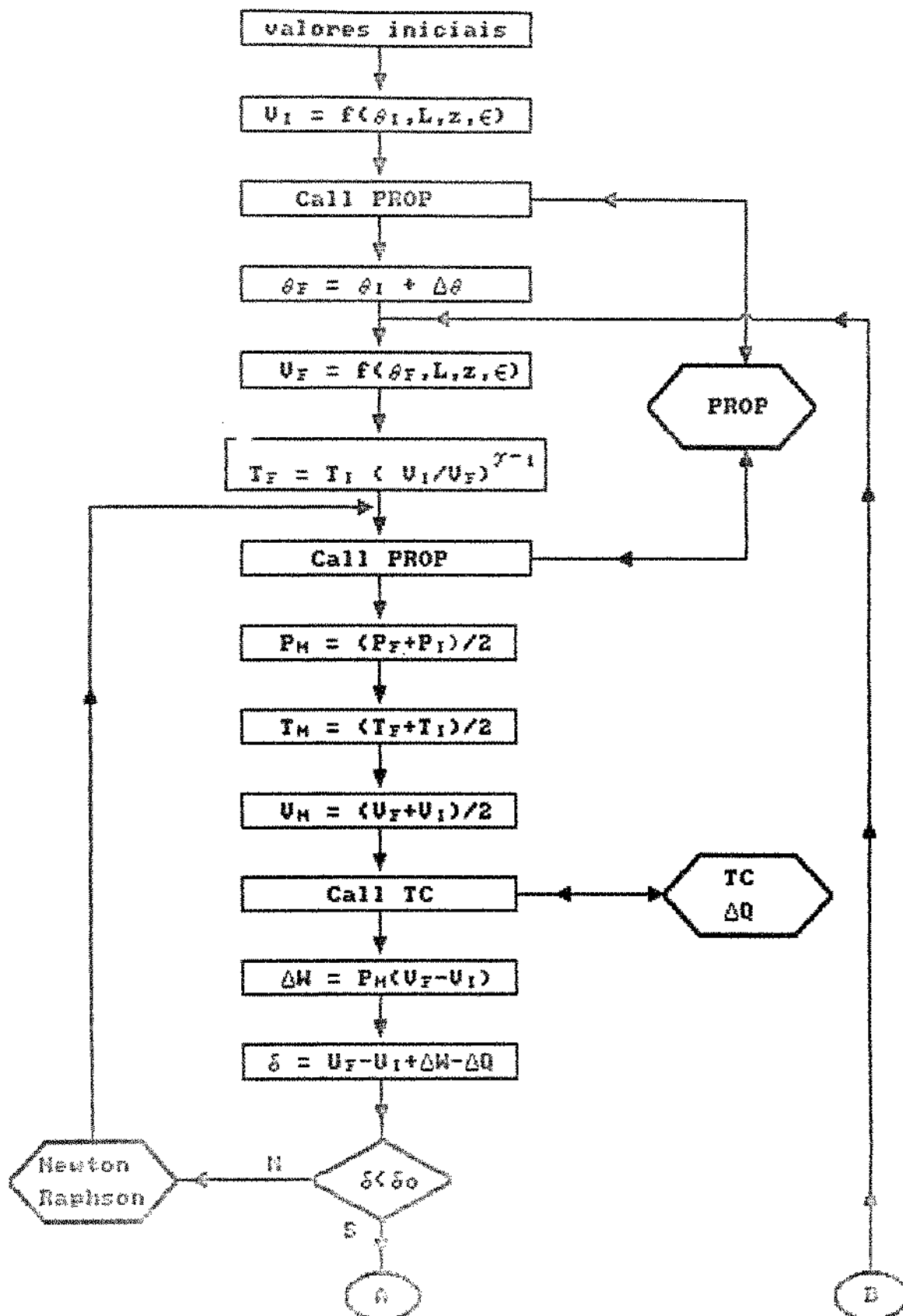
Fluxograma Global do Programa



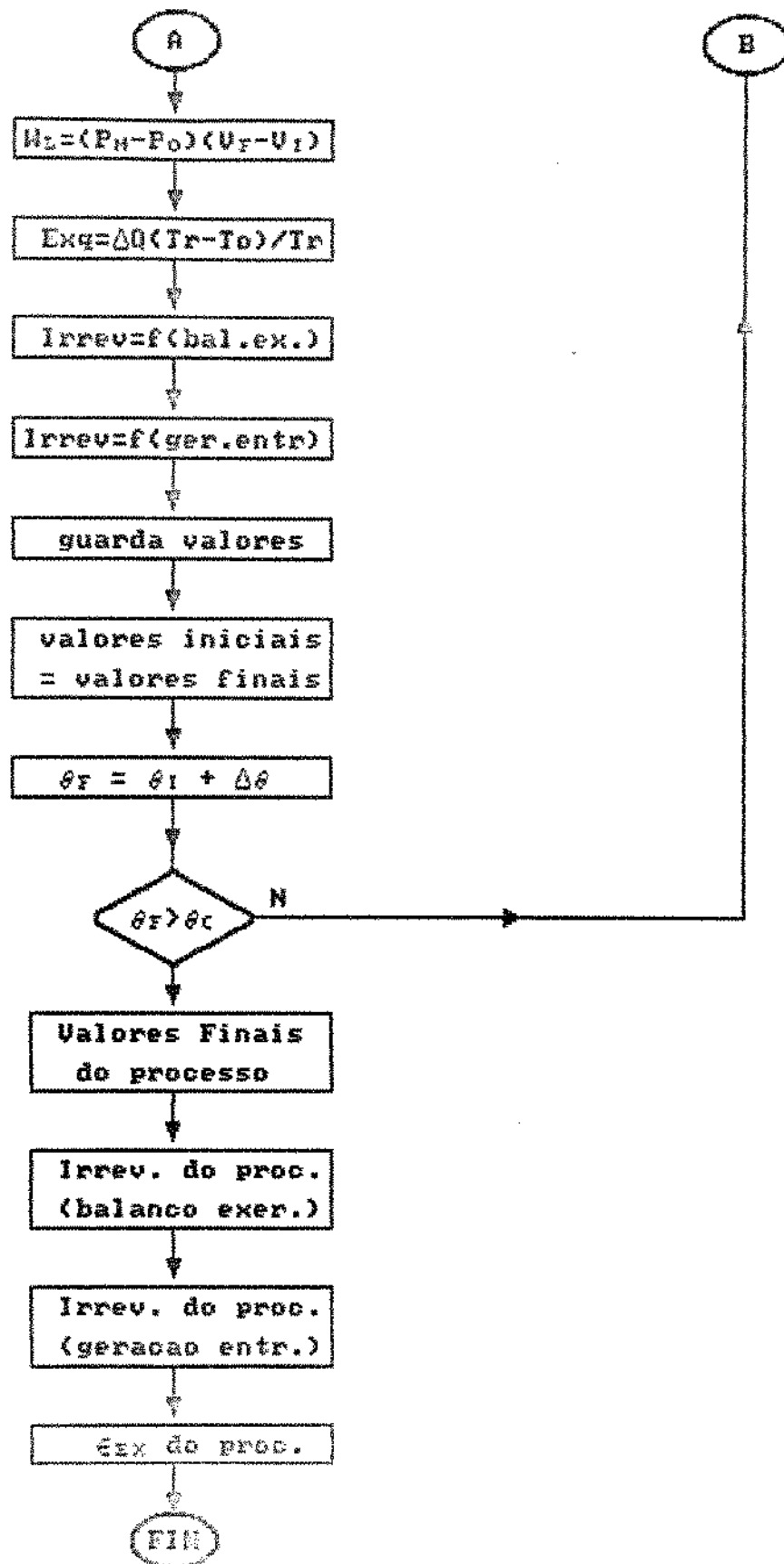
Calculos Preliminares



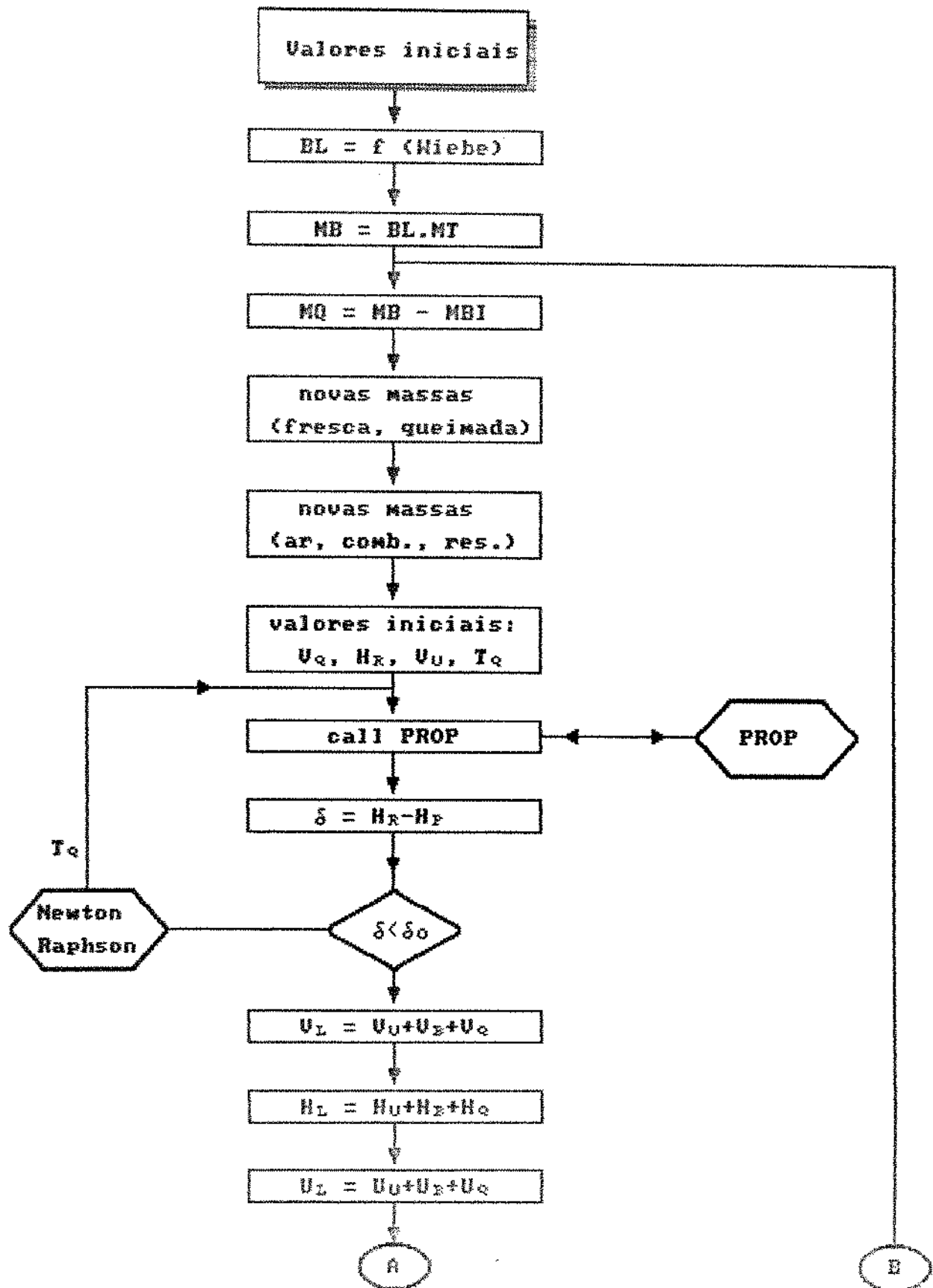
Fluxograma da Compressao



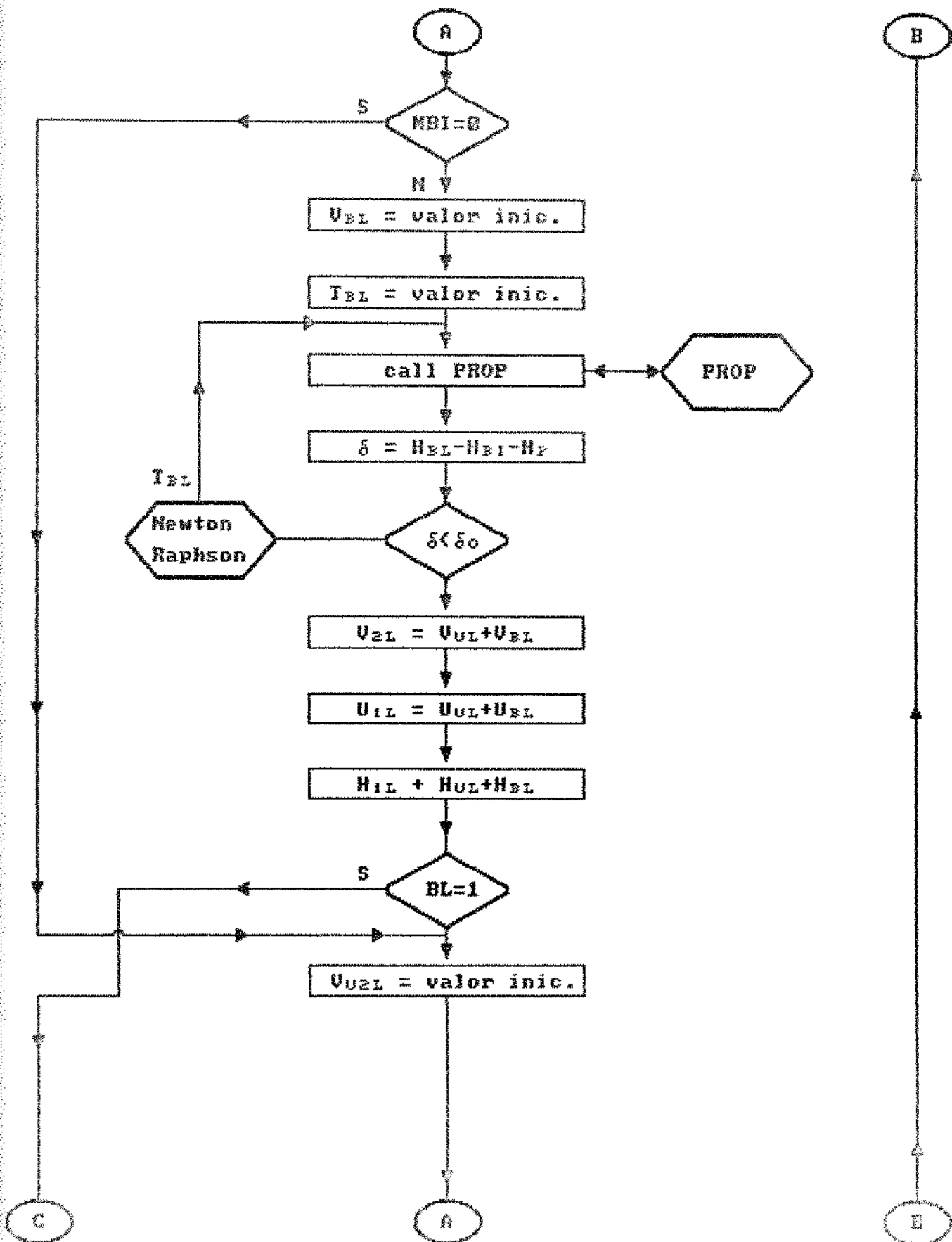
Compressao (cont.)



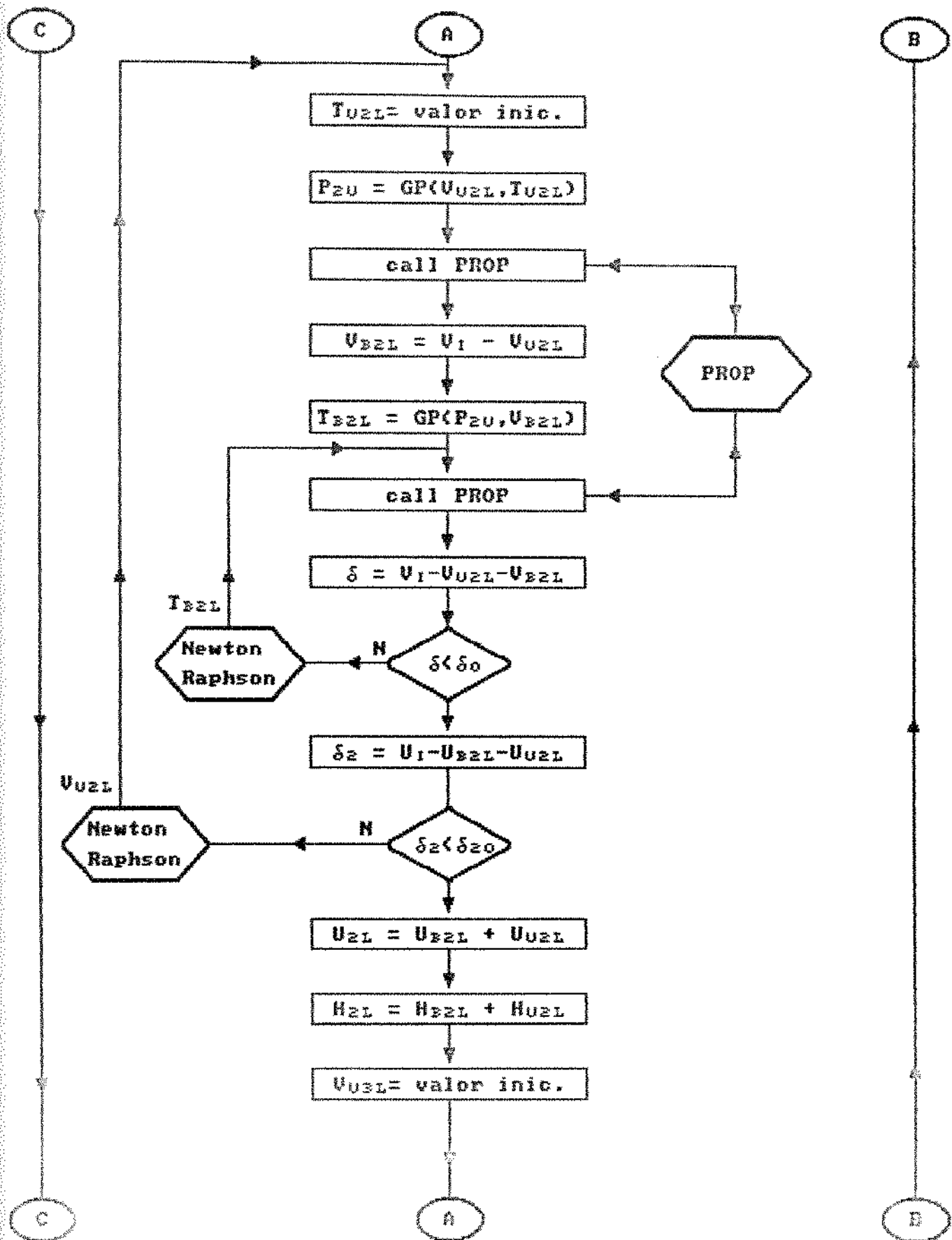
Fluxograma da Combustao



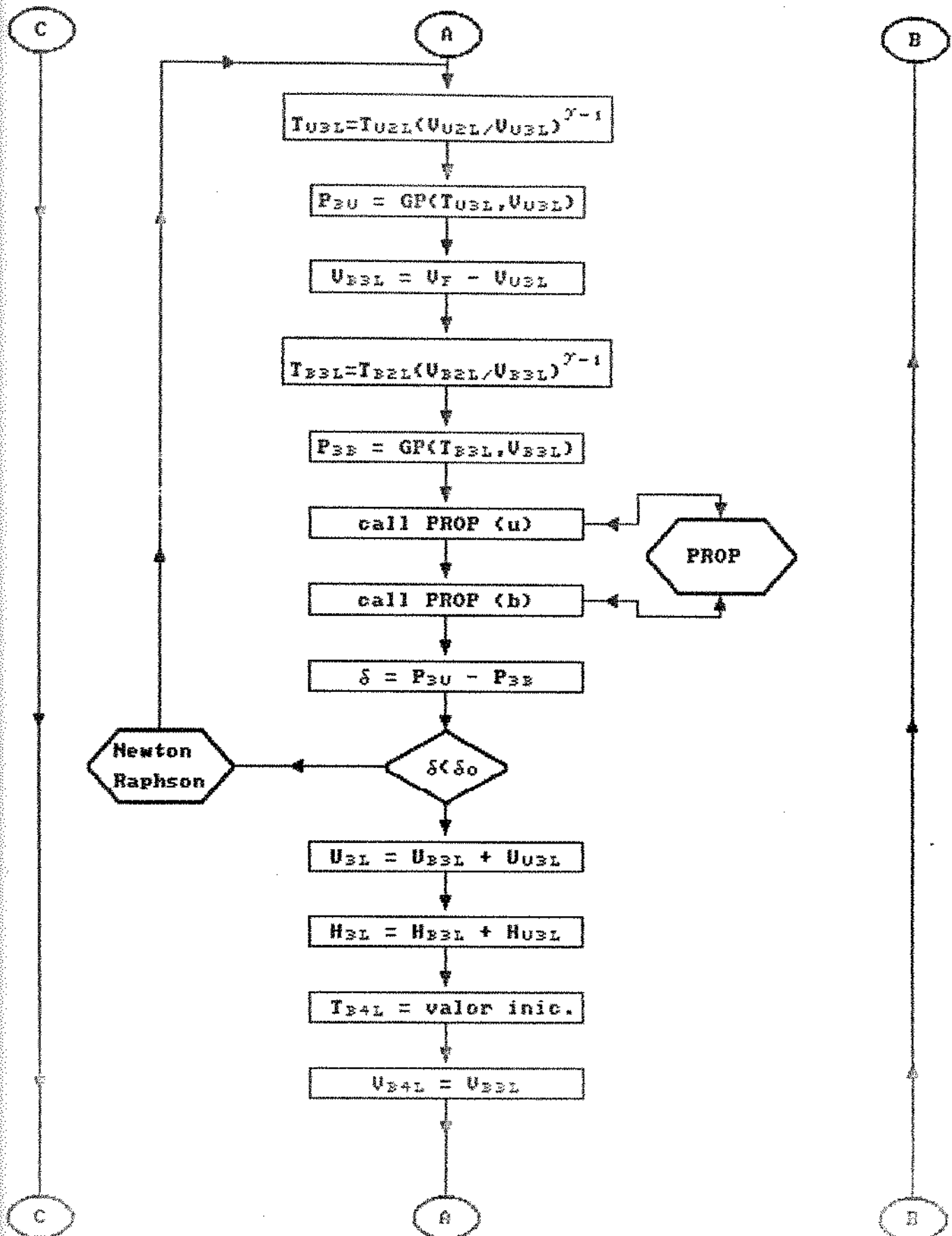
Combustao (cont. 1)



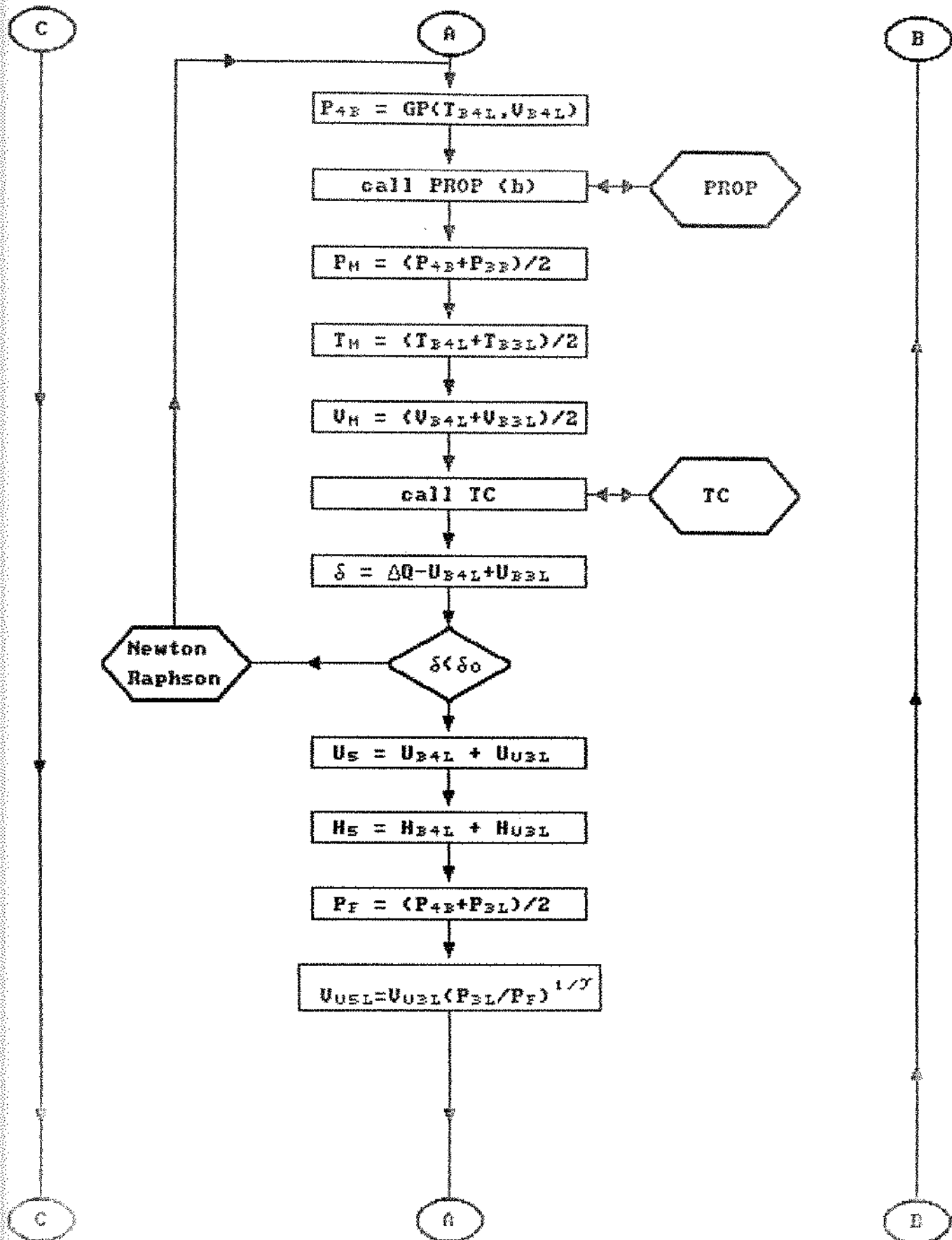
Combustao (cont. 2)



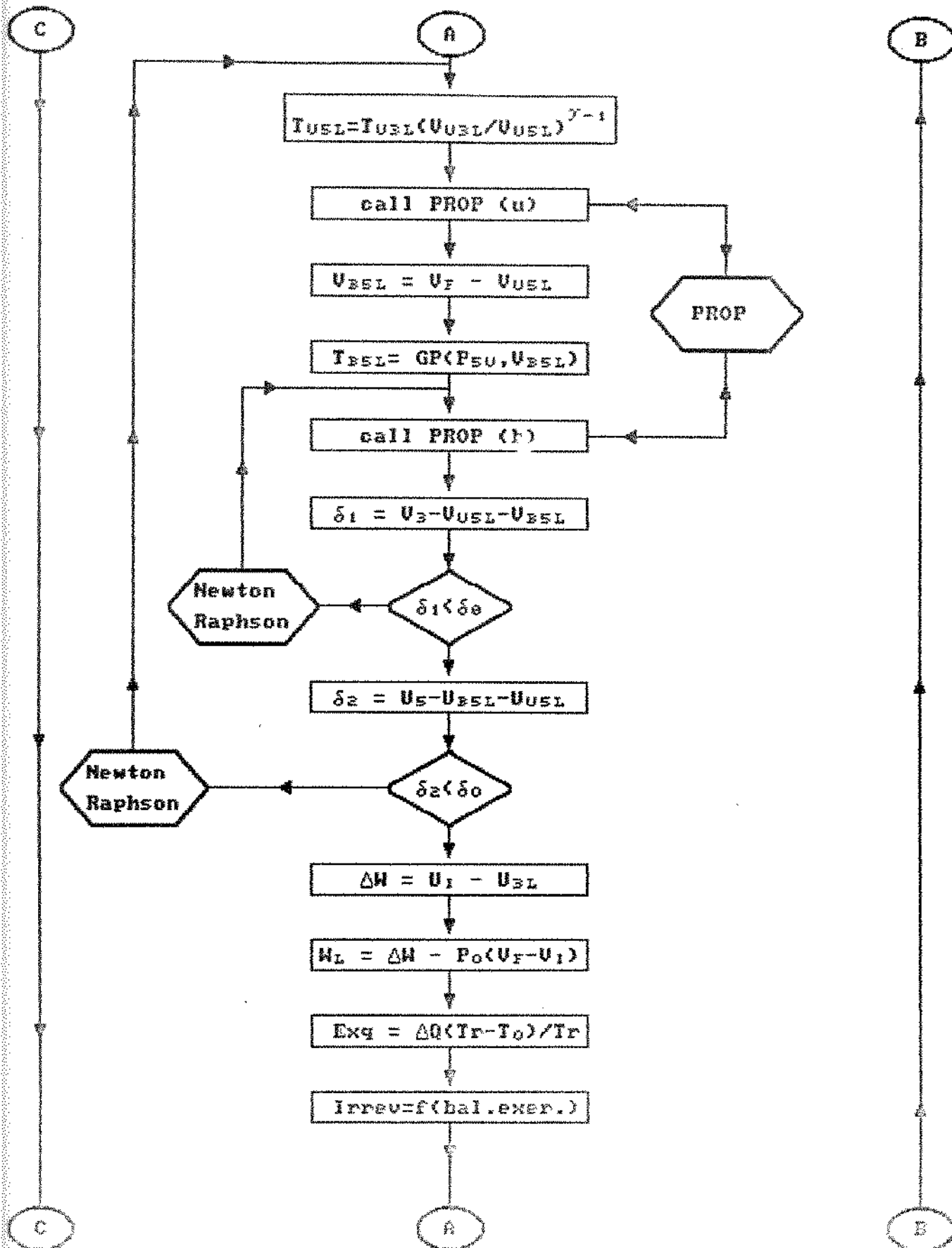
Combustao (cont. 3)



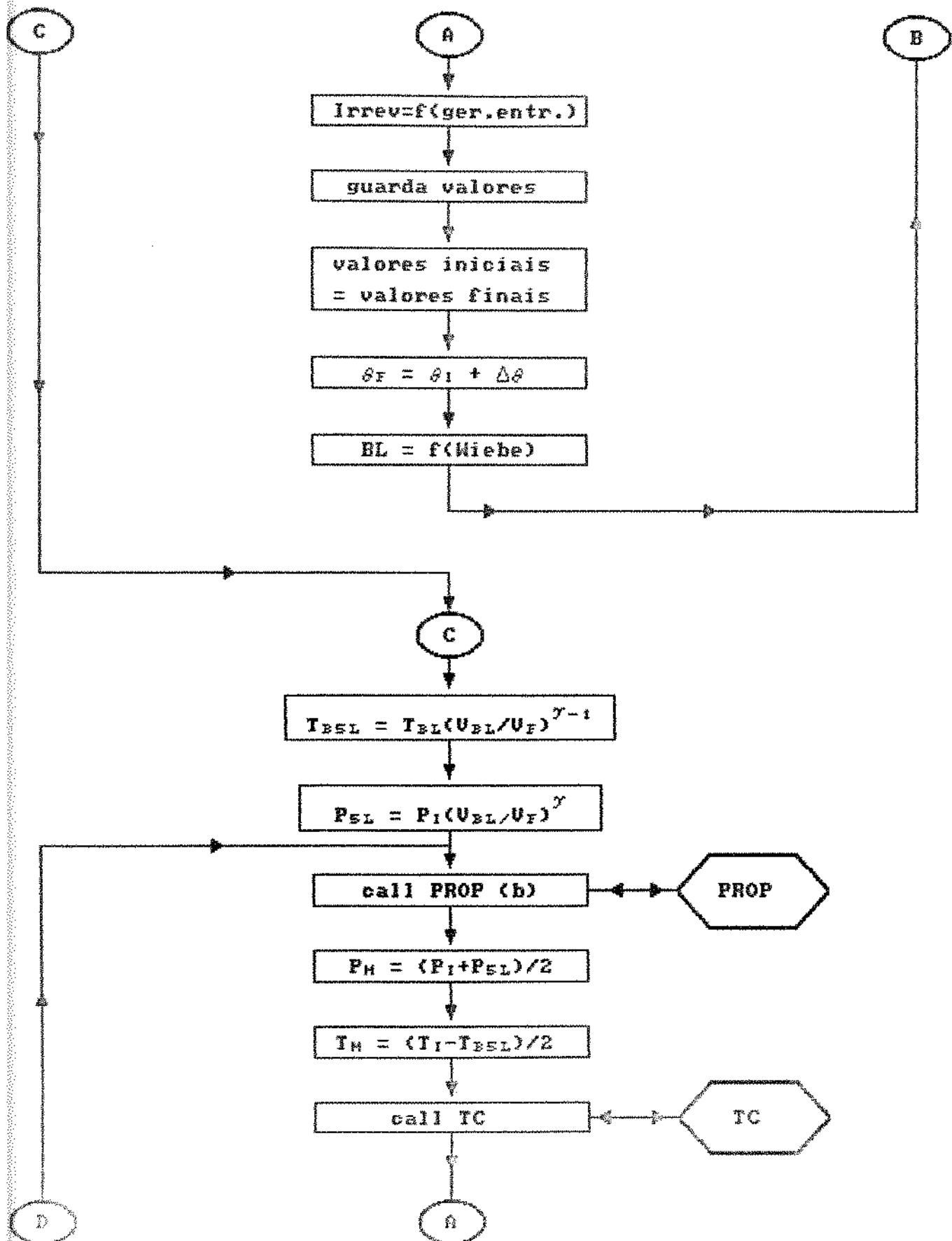
Combustao (cont. 4)



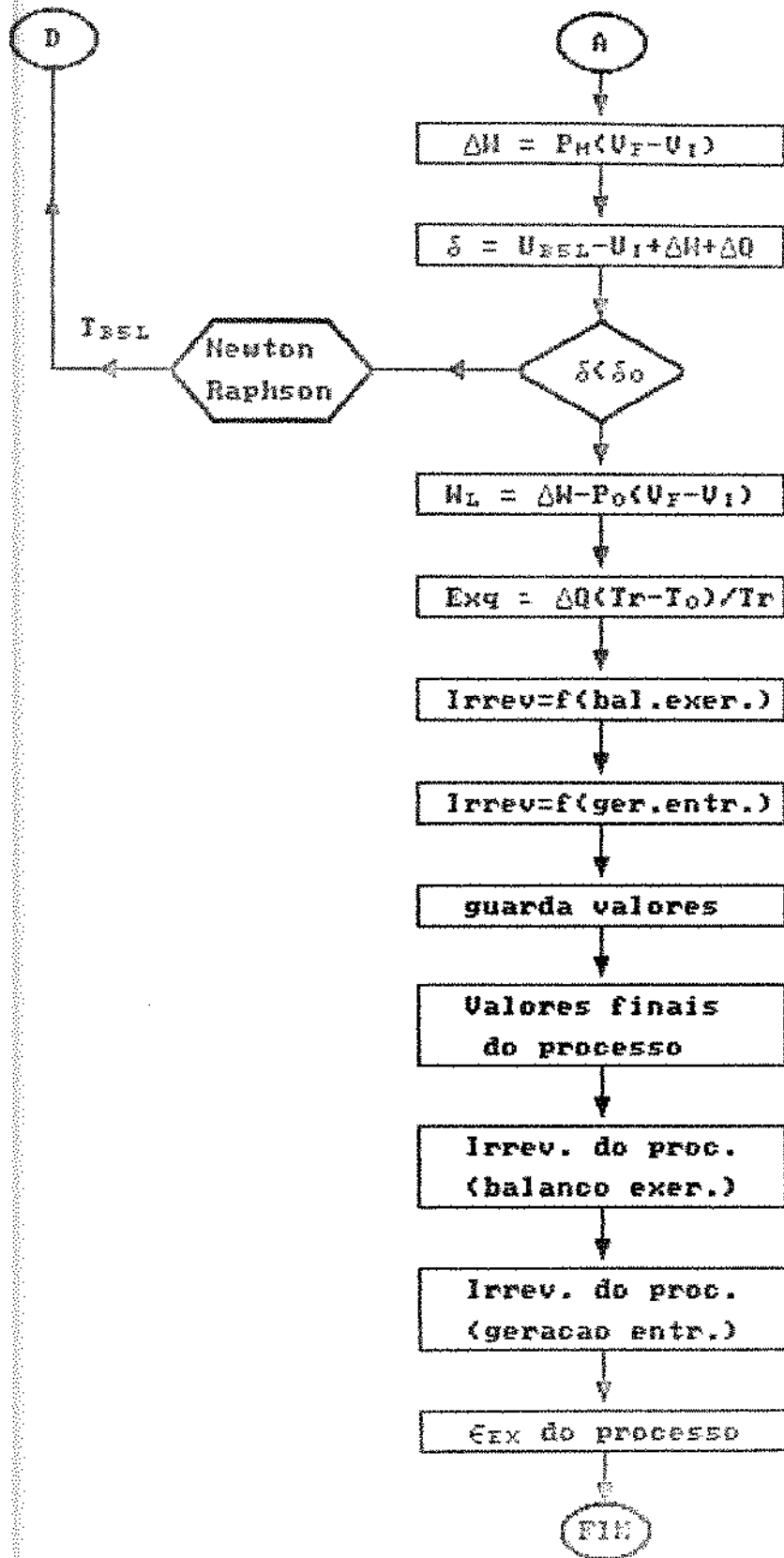
Combustao (cont. 5)



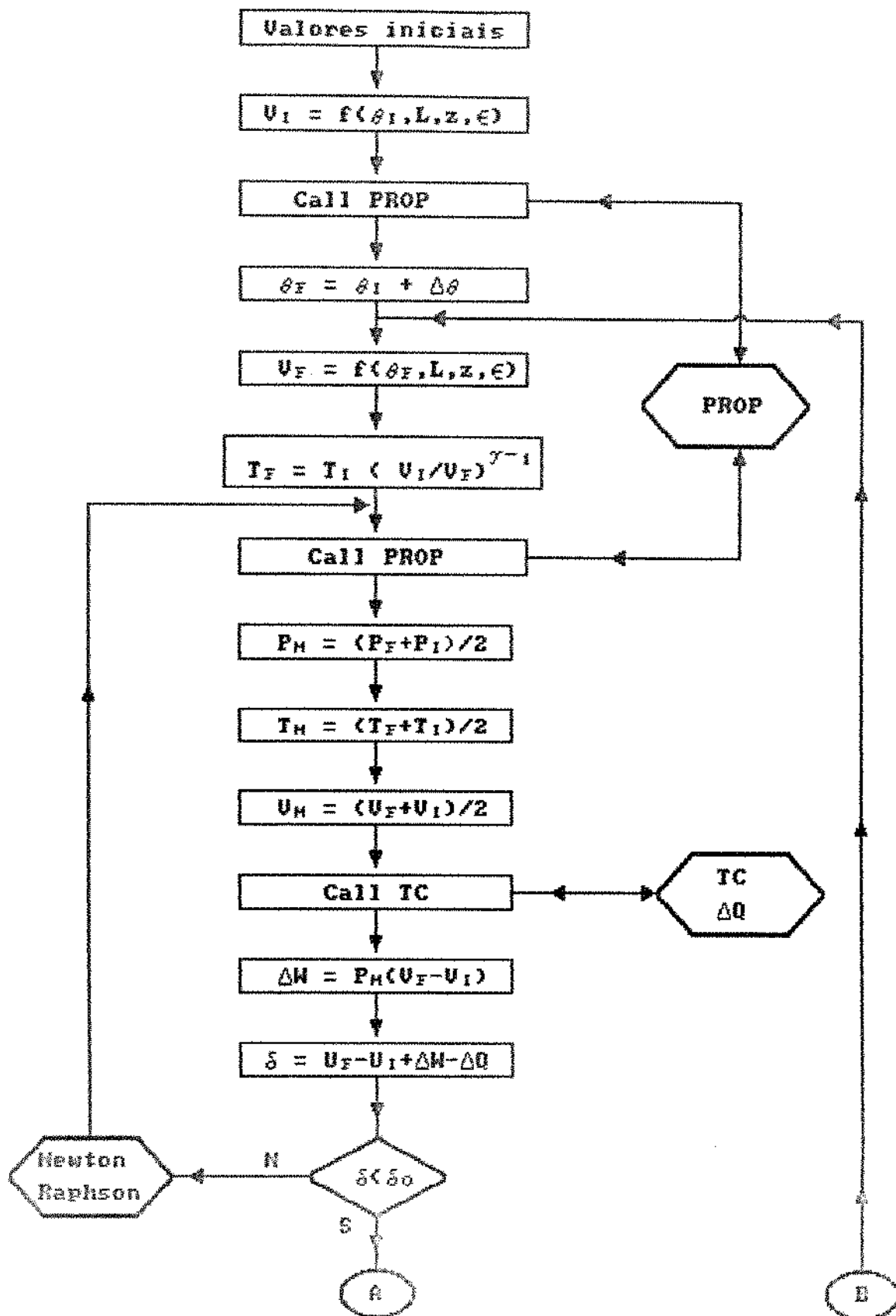
Combustao (cont. 6)



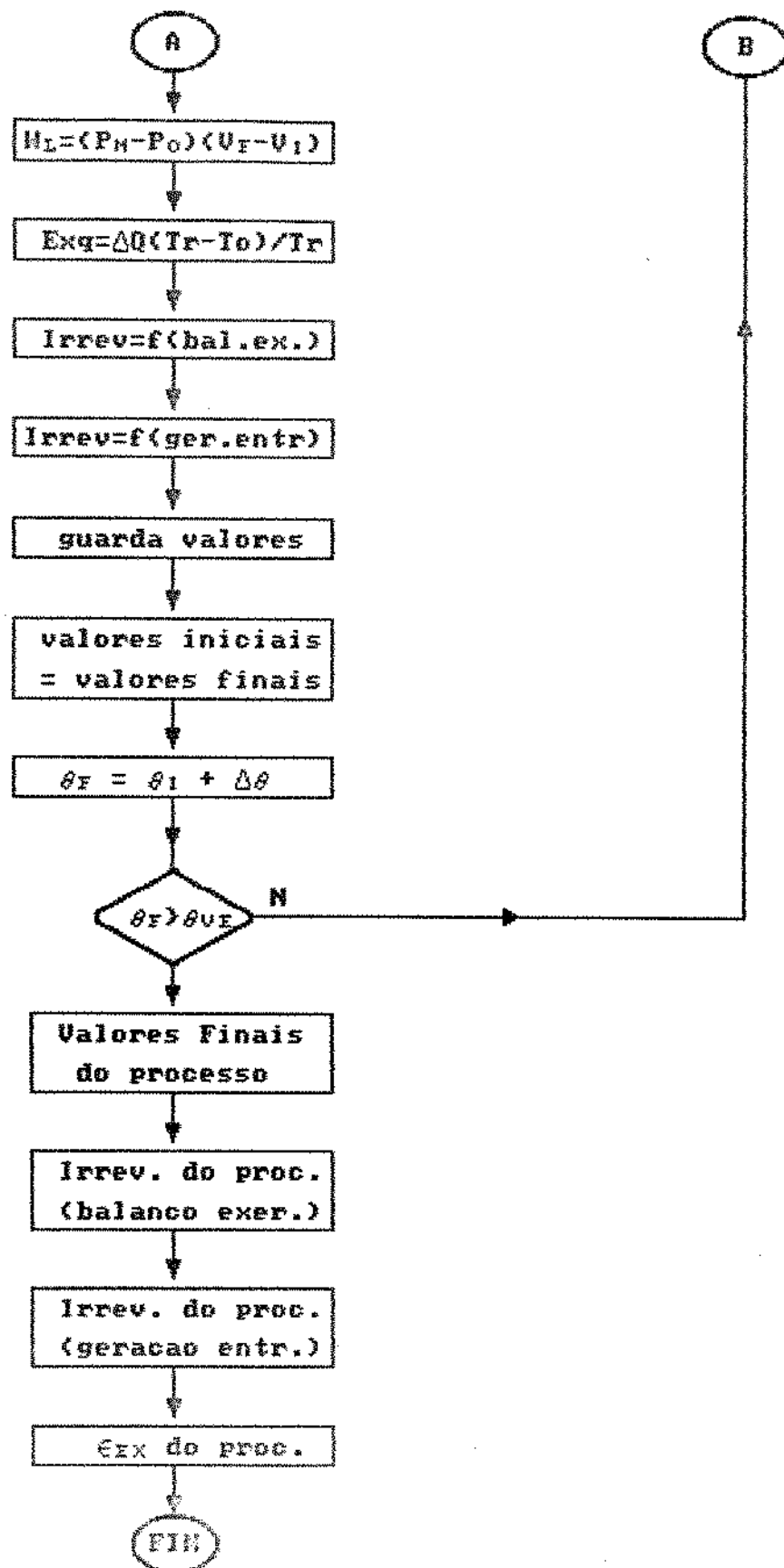
Combustao (cont. 7)



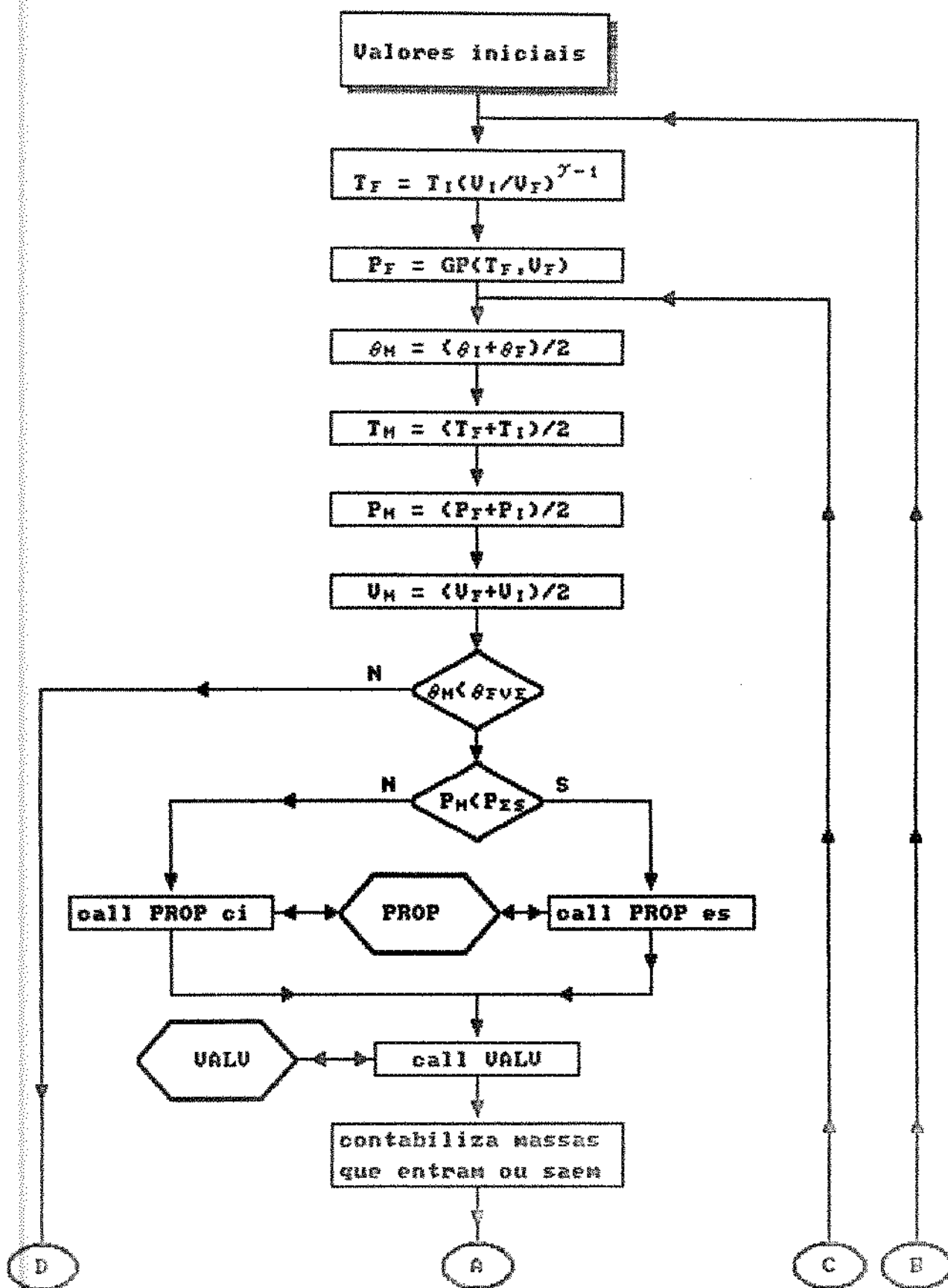
Fluxograma da Expansao



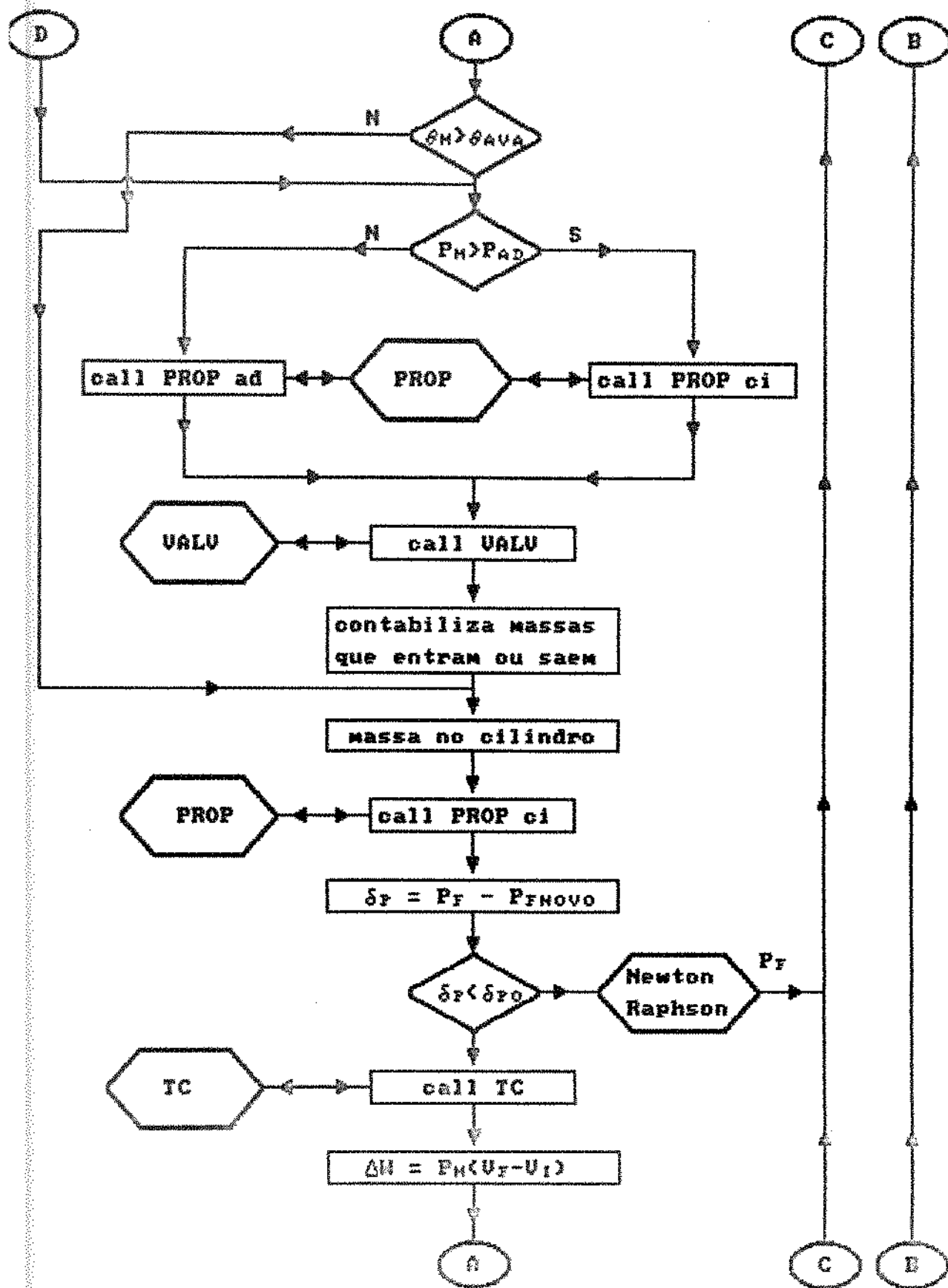
Expansao (cont.)



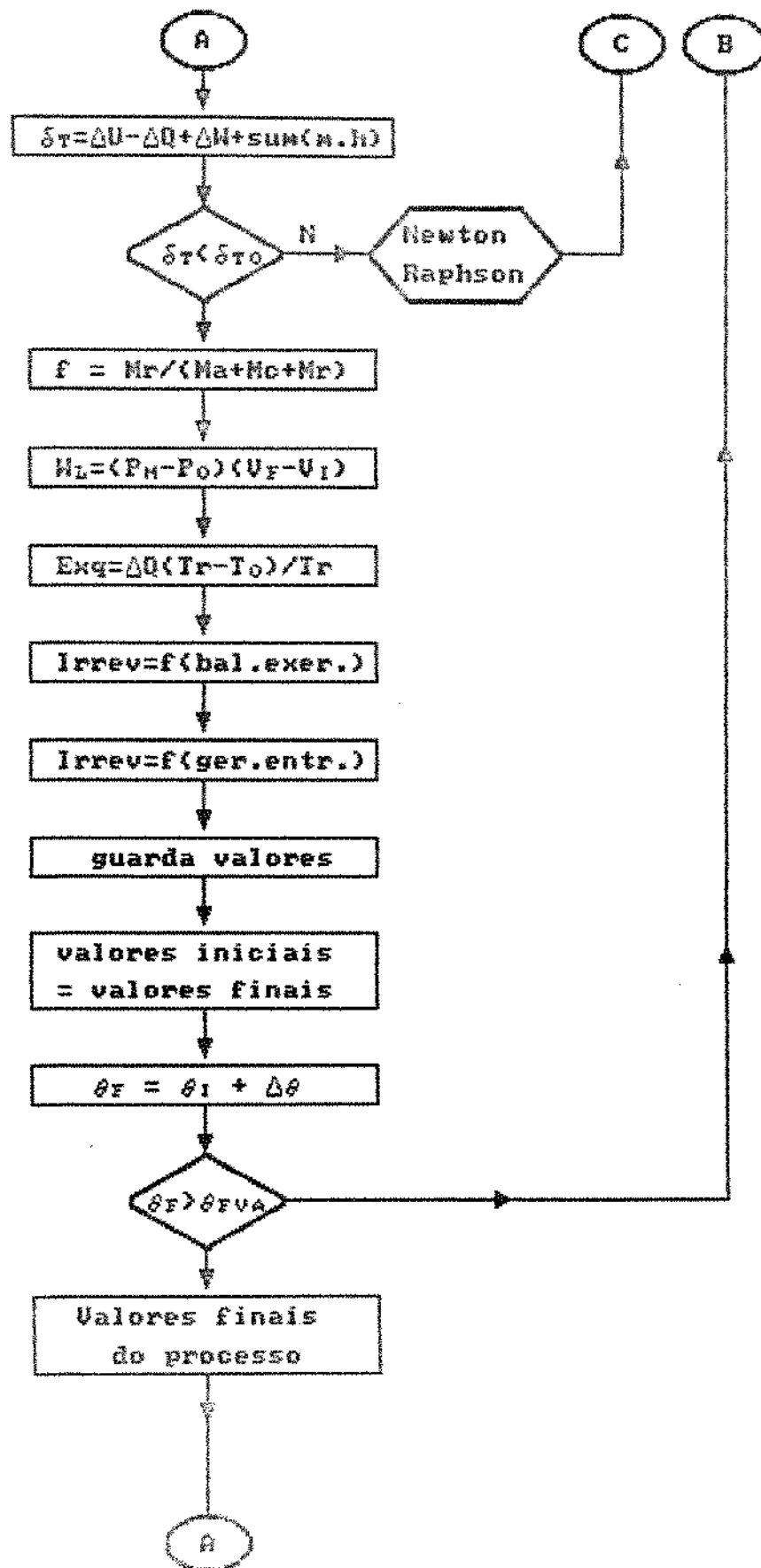
Fluxograma da Fase Aberta



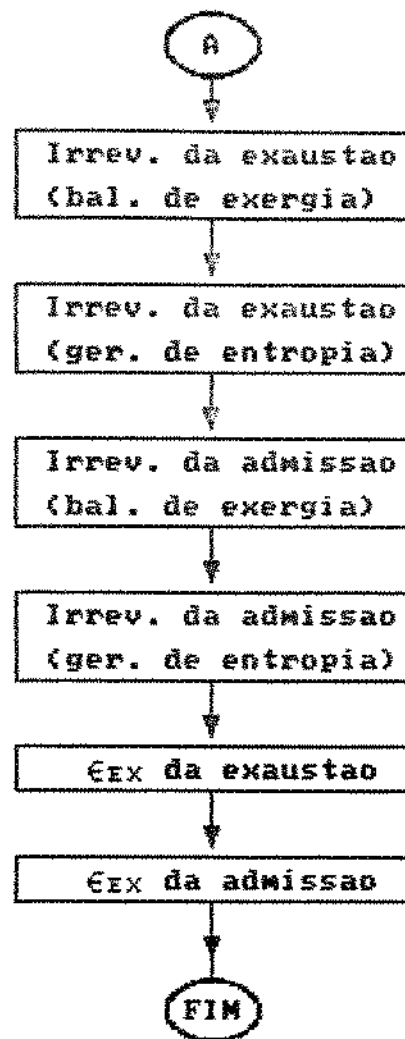
Fase Aberta (cont. 1)



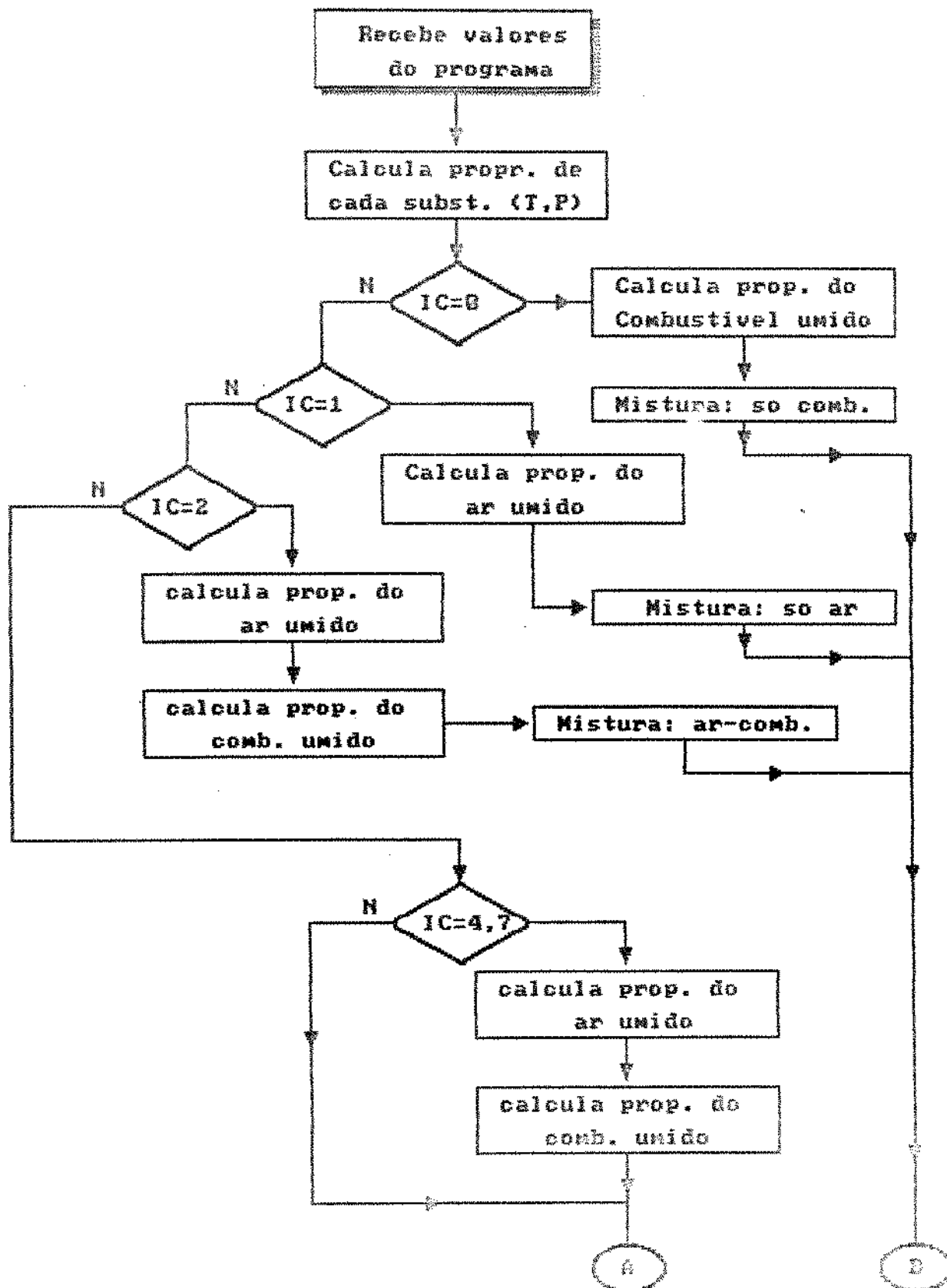
Fase Aberta (cont. 2)



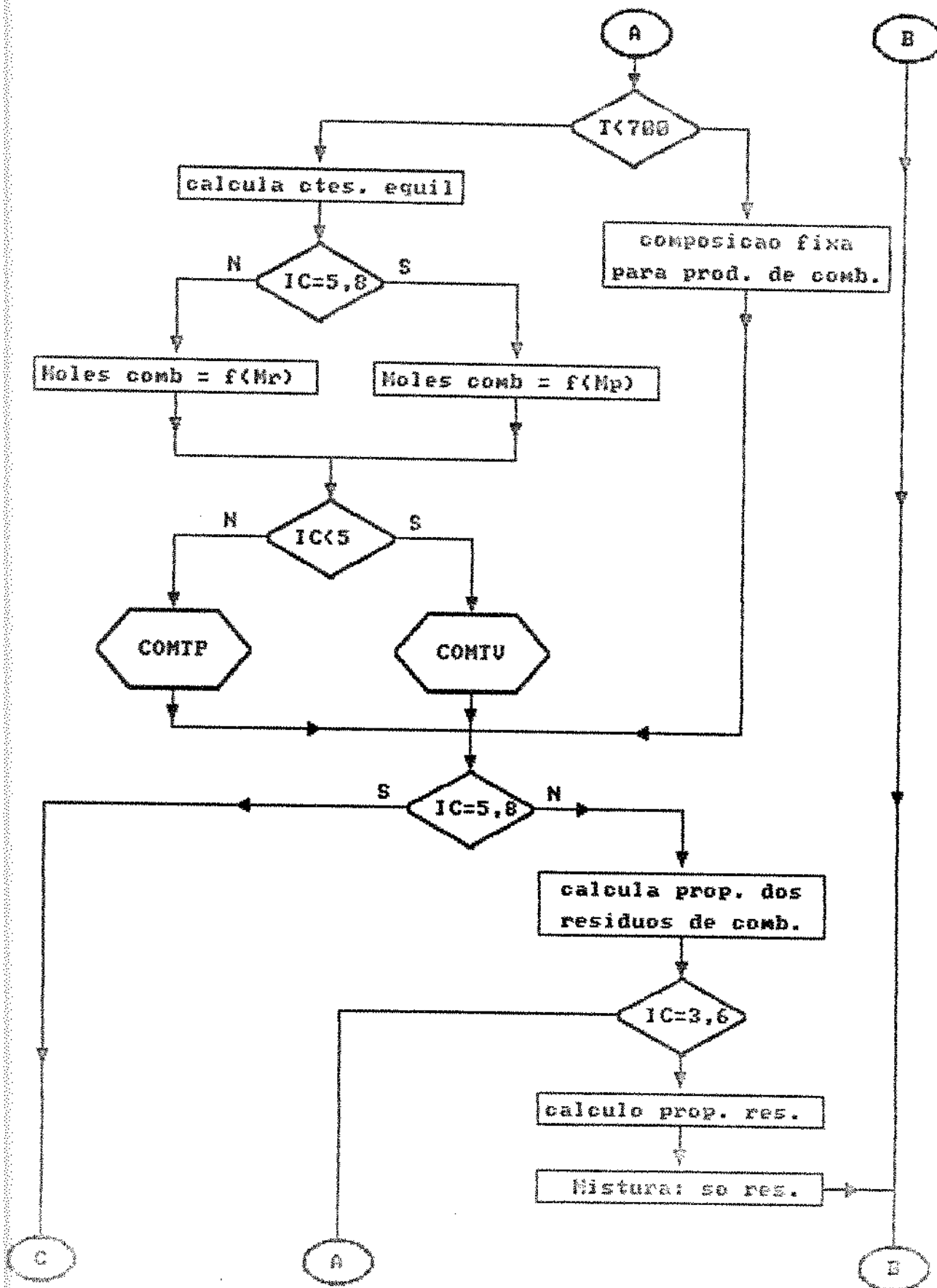
Fase Aberta (cont. 3)



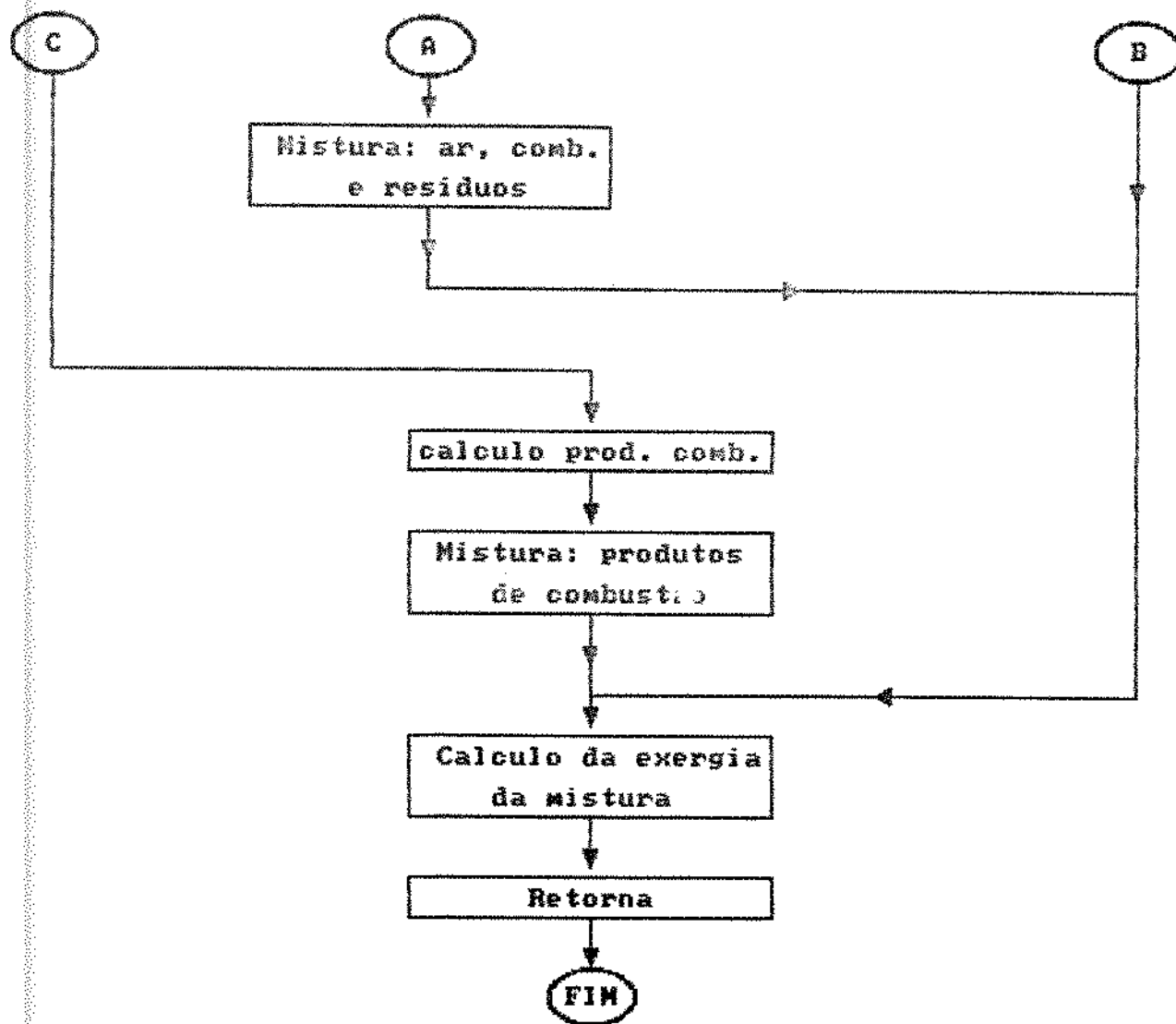
Fluxograma da Sub-rotina PROP



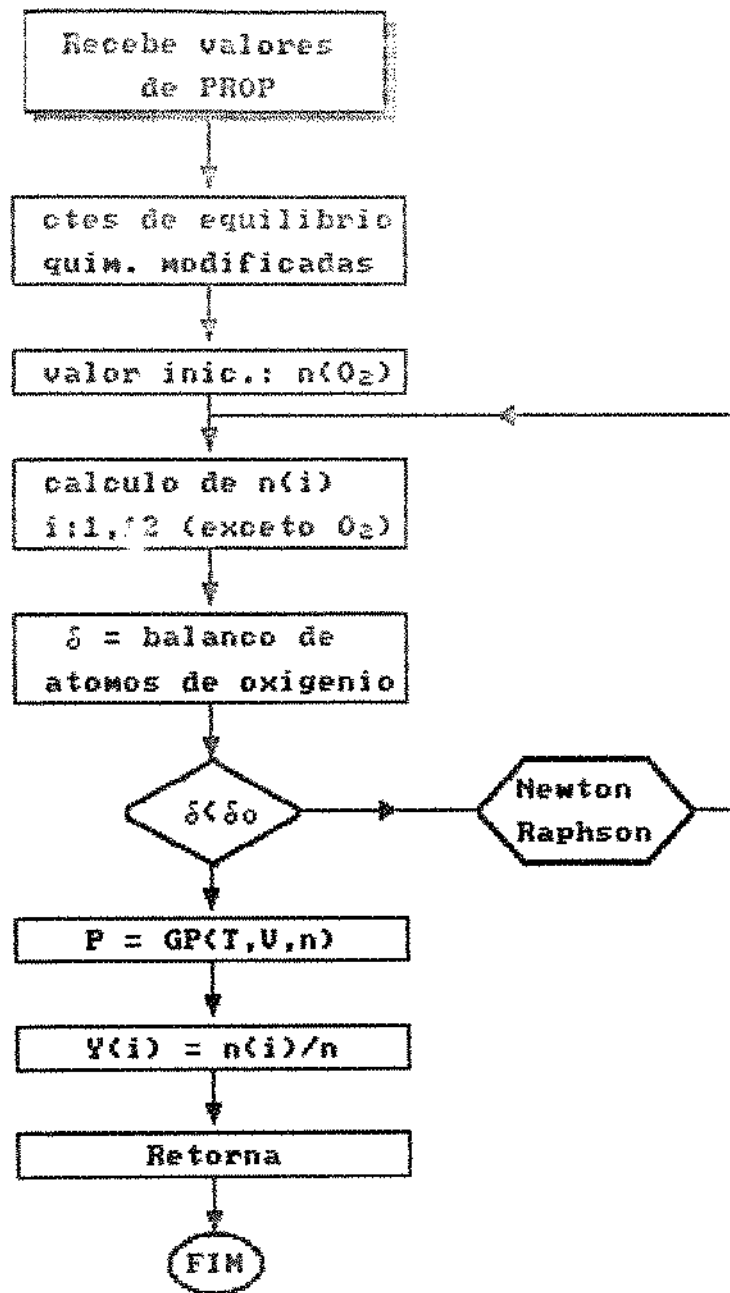
Sub-rotina PROP (cont. 1)



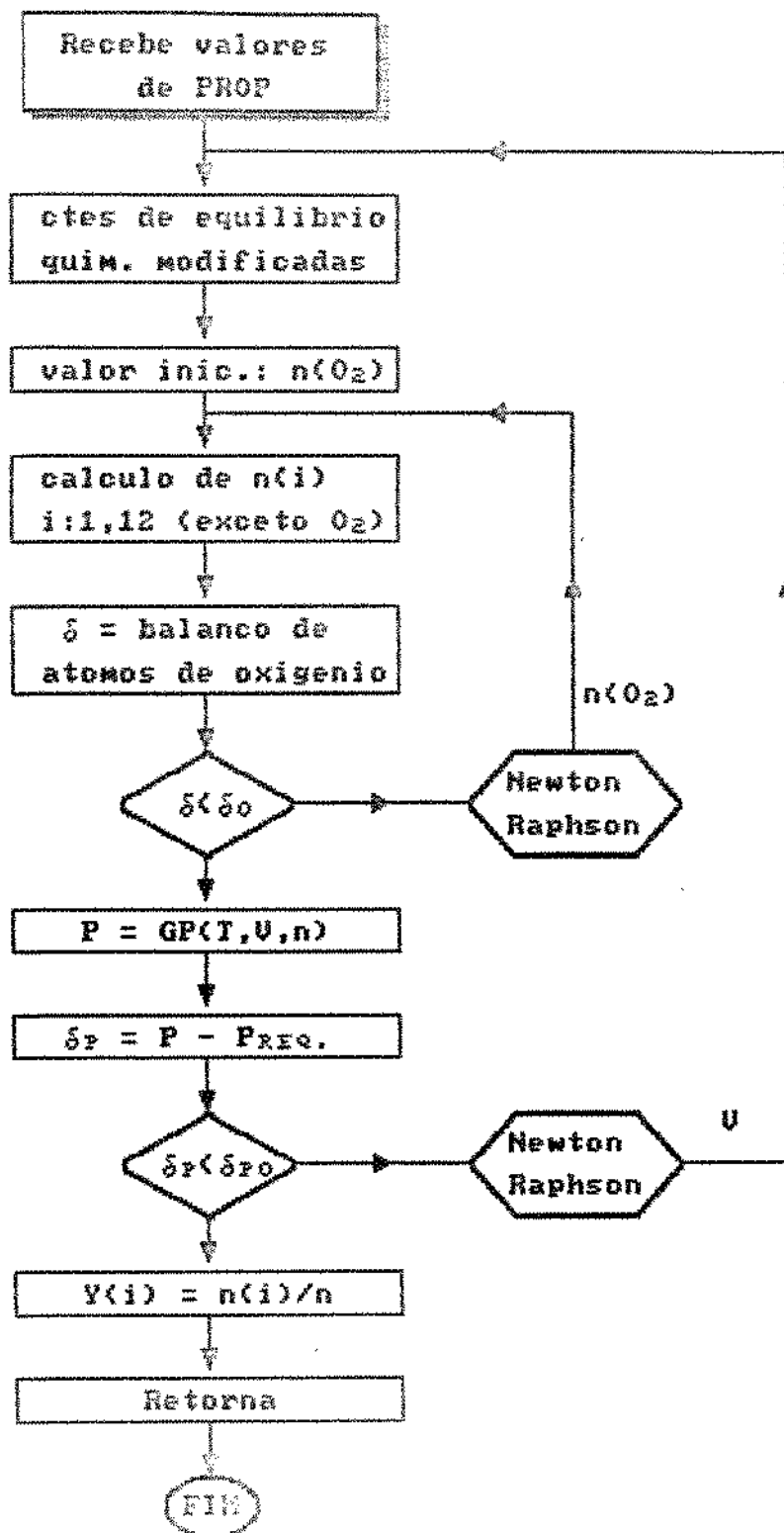
Sub-rotina PROP (cont. 2)



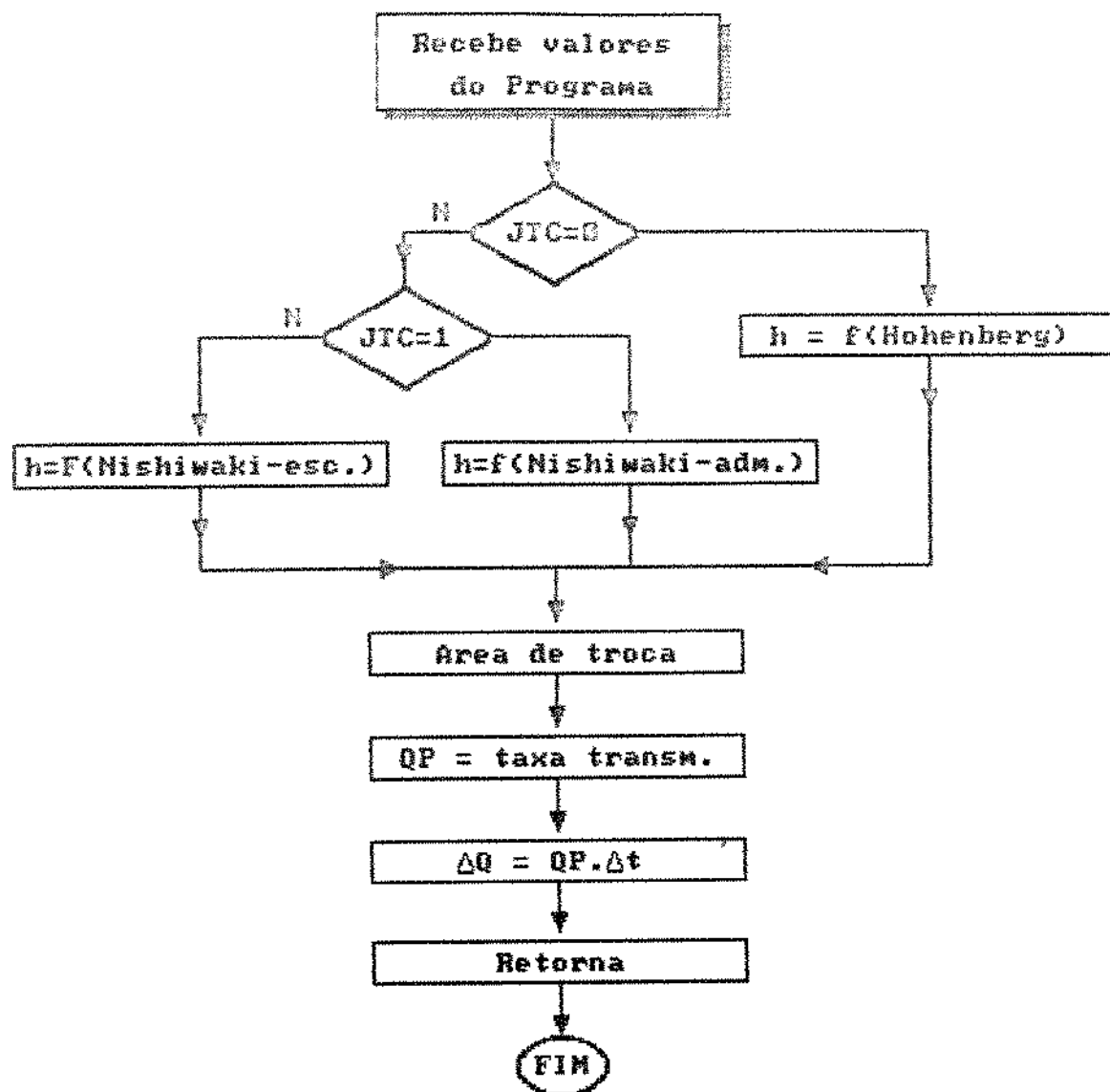
Fluxograma da Sub-rotina COMTV



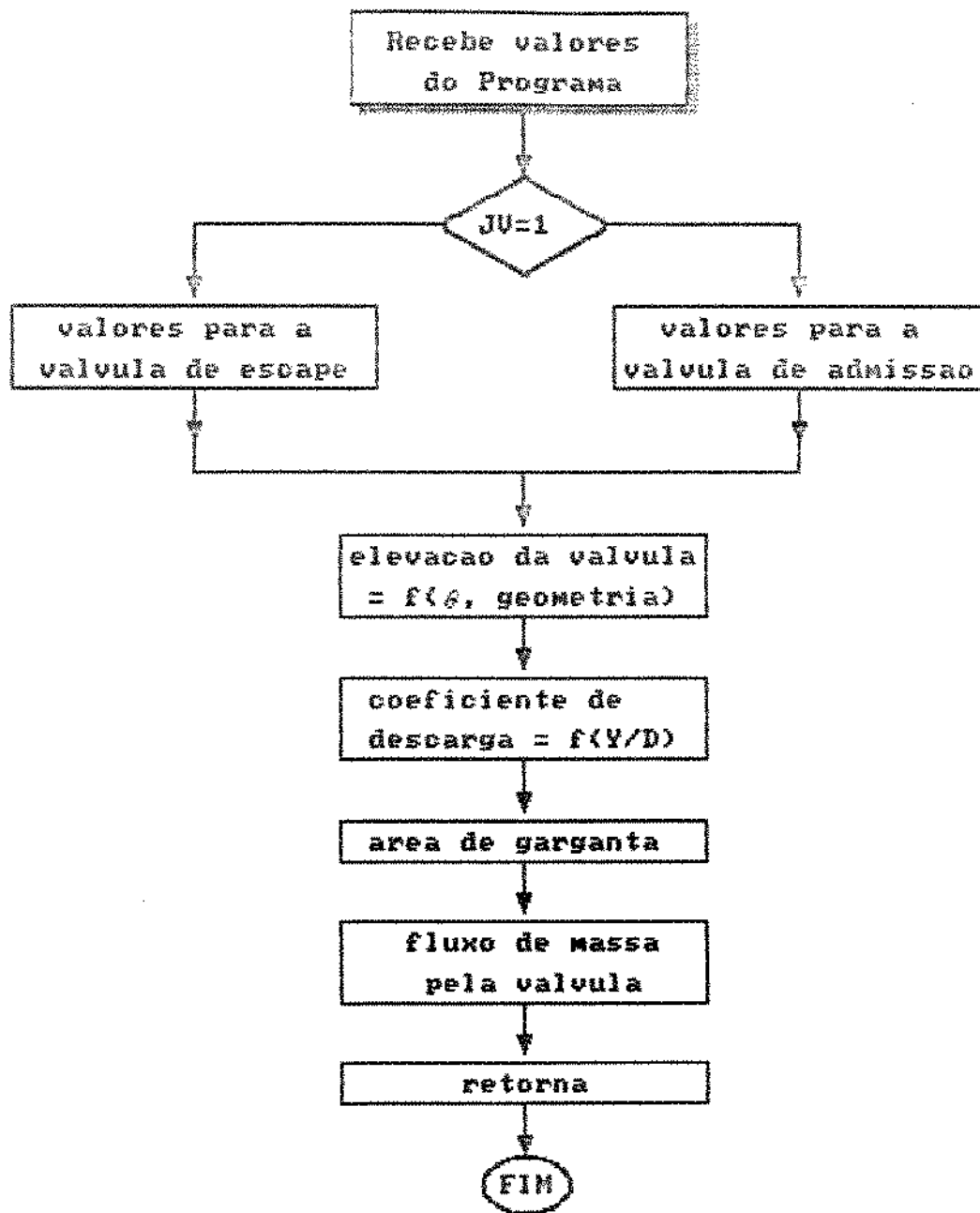
Fluxograma da Sub-rotina COMTP



Fluxograma da Sub-rotina TC



Fluxograma da Sub-rotina VALV



APÊNDICE 6 : COEFICIENTES DE DESCARGA

O coeficiente de descarga é definido como a relação entre a descarga em massa real e a descarga em massa associada a um processo isentrópico de escoamento entre as pressões à montante e à jusante de uma válvula:

$$C_D = \frac{\dot{m}}{\dot{m}_{iso}} \quad (A6.1)$$

No trabalho de Kastner *et alii* [175] é mostrado que o coeficiente de descarga é praticamente independente da relação de pressões e do tamanho da válvula e fortemente influenciado pela elevação instantânea adimensional da válvula (Y/D). O formato da curva de C_D versus Y/D é bastante complexo, correspondendo a regiões de escoamento distintas, que são discutidas em detalhe na referência citada.

Para empregar os resultados de Kastner, utilizou-se um método de mínimos quadrados a partir de valores lidos na Figura 4 da referência, para se obter um polinômio interpolador de grau 10. Valores menores para o grau do polinômio conduzem a erros grandes em C_D calculado quando comparado ao C_D medido, uma vez que a curva experimental é muito sinuosa. A expressão para C_D calculado em função da elevação instantânea adimensional Y/D é:

$$C_D = \sum_{i=1}^{11} A_{i-1} \left(\frac{Y}{D} \right)^{i-1} \quad (A6.2)$$

onde os coeficientes A_{i-1} são dados na Tabela A.6.1.

Tabela A.6.1 - Os coeficientes do polinômio interpolador para o coeficiente de descarga C_d

Coeficiente	Valor do Coeficiente
A_0	0,9999876
A_1	$7,633573 \cdot 10^{-1}$
A_2	$-4,089484 \cdot 10^2$
A_3	$1,885862 \cdot 10^4$
A_4	$-4,016319 \cdot 10^5$
A_5	$4,720187 \cdot 10^6$
A_6	$-3,295265 \cdot 10^7$
A_7	$1,401485 \cdot 10^8$
A_8	$-3,567916 \cdot 10^8$
A_9	$5,004000 \cdot 10^8$
A_{10}	$-2,977371 \cdot 10^8$

Os resultados obtidos com o polinômio interpolador estão apresentados na Tabela A.6.2. Os erros percentuais relativos aos valores experimentais são bastante razoáveis, com um valor máximo de 0,95% . Deve ser ressaltado que os valores experimentais foram lidos de um gráfico e portanto possuem também uma incerteza associada à leitura que não é menor do que 1%. Dessa forma, pode-se dizer que os erros indicados na Tabela A.6.2 não têm significado pois estão dentro da incerteza dos próprios valores experimentais a partir dos quais foram obtidos os coeficientes do polinômio interpolador.

A Figura A.6.1 mostra o gráfico do coeficiente de descarga em função da elevação adimensional da válvula Y/D . Os pontos assinalados no gráfico correspondem aos valores experimentais e a curva contínua aos valores calculados pelo polinômio interpolador.

Tabela A.6.2 - Coeficientes de descarga em função da elevação instantânea. Valores experimentais, calculados pelo polinômio interpolador e os erros percentuais respectivos.

Y/D	Valor Experim.	Valor Calculado	Erro Porc.
0,000	1,00	0,999999	-0,00124
0,025	0,94	0,94011	0,01176
0,050	0,92	0,91959	-0,04480
0,075	0,89	0,89082	0,09200
0,100	0,85	0,84904	-0,11247
0,125	0,84	0,84099	0,11830
0,150	0,86	0,85792	-0,24233
0,175	0,84	0,84463	0,55095
0,200	0,78	0,77325	-0,86508
0,225	0,67	0,67634	0,94645
0,250	0,61	0,60611	-0,63701
0,275	0,58	0,58151	0,26096
0,300	0,60	0,59966	-0,05705
0,325	0,62	0,62003	0,00554

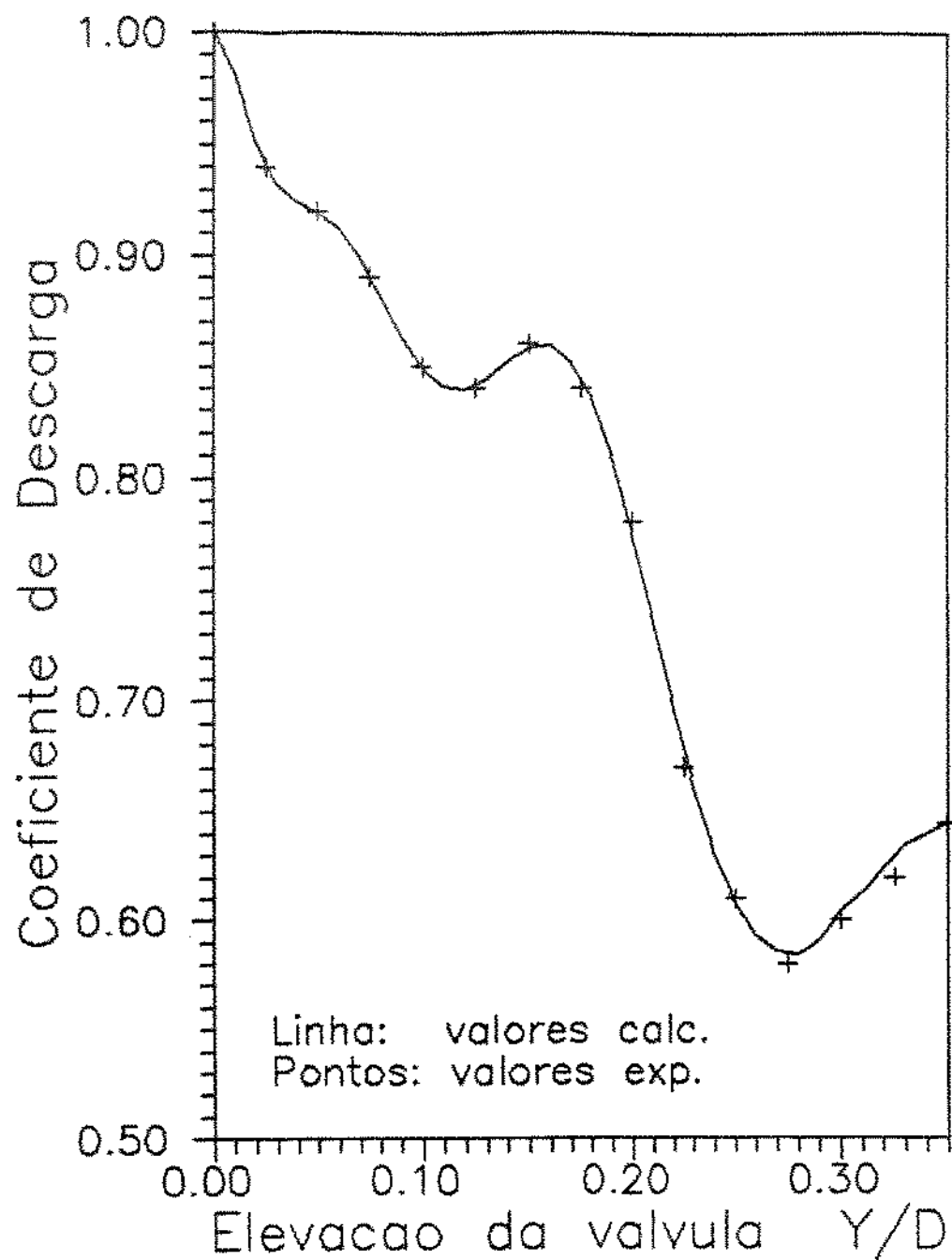


Figura A.6.1 - Coeficientes de descarga em função da elevação adimensional da válvula.