

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENERGIA

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE A REDAÇÃO FINAL
DA TESE DEFENDIDA POR JOSE ANTONIO A.
VELÁSQUEZ ALEGRE E APROVADA PELA
COMISSÃO JULGADORA EM 30/05/93


ORIENTADOR

SIMULAÇÃO DOS PROCESSOS E
ANÁLISE EXERGÉTICA
DO MOTOR DE CICLO DIESEL

12/93

Trabalho apresentado à Comissão de Pós-Graduação
da Faculdade de Engenharia Mecânica como parte
dos requisitos para obtenção do título de **Doutor**
em Engenharia Mecânica.

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

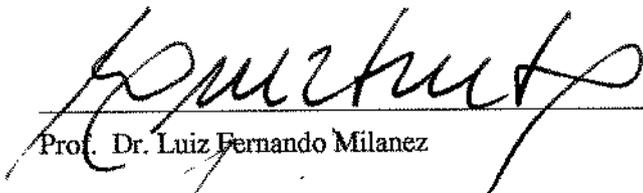
TESE DE DOUTORADO

SIMULAÇÃO DOS PROCESSOS E ANÁLISE
EXERGÉTICA DO MOTOR DE CICLO DIESEL

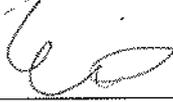
Autor : José Antonio Andrés Velásquez Alegre ^{SVA}

Orientador: Luiz Fernando Milanez ^T

Aprovado por:



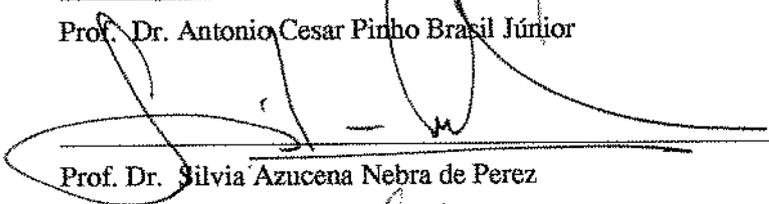
Prof. Dr. Luiz Fernando Milanez



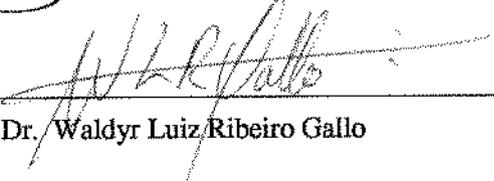
Prof. Dr. Emanuel Rocha Woiski



Prof. Dr. Antonio Cesar Pinho Brasil Júnior



Prof. Dr. Silvia Azucena Nebra de Perez



Prof. Dr. Waldyr Luiz Ribeiro Gallo

A Vilma e Bruna, com muito carinho.

Aos meus pais — Juan e Delia.

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Luiz Fernando Milanez, pela orientação segura e pela sua constante preocupação em criar as melhores condições para a realização deste trabalho.

À Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), pela concessão de bolsa de estudo durante a realização deste trabalho.

Ao Instituto de Automóveis e Rodovias de Moscou, que possibilitou a realização da parte experimental deste trabalho.

Aos colegas e companheiros do Departamento de Energia, pela amizade e pela agradável convivência durante todos estes anos. Em especial a Renato M. Picado pelo invalorável apoio nos momentos mais difíceis.

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

Resumo

Dois modelos de simulação dos processos que ocorrem no motor de ciclo diesel foram desenvolvidos neste trabalho. O primeiro deles, chamado aqui de *modelo de diagnose*, permite analisar o processo de combustão de um motor real, quando se dispõe do diagrama de pressão no cilindro, determinado experimentalmente. O segundo modelo, chamado de *modelo preditivo*, permite simular o ciclo completo de um motor real ou hipotético, quando a taxa de queima de combustível é especificada *a priori*. O modelo preditivo resolve as equações que governam o escoamento transitório de um fluido compressível, como ocorre nos dutos de admissão e escape, utilizando o Método das Características. Os efeitos da variação da área transversal dos dutos, a transferência de calor e o atrito nas paredes são levados em conta.

Em ambos os modelos são determinados os termos do balanço de exergia e as exergias química, termomecânica e termoquímica para o volume de controle que inclui os gases no cilindro do motor. Exemplos da aplicação destes modelos são incluídos no presente trabalho.

Simulation of Processes and Exergetic Analysis of a Diesel Engine

ABSTRACT

Two simulation models of diesel engine processes were developed. The first model, called the diagnose model, allows the analysis of the combustion process of a real engine when the cylinder pressure diagram, obtained from experiments, is available. The second model, called the predictive model, can be used to simulate the entire cycle of real or hypothetical engines, when the fuel burning rate is specified. The predictive model solve the equations governing the transient flow of a compressible fluid occurring in the admission and exhaust ducts, using the Method of Characteristics. The effects of duct cross sectional area variations, heat transfer and wall friction are taken into account.

In both models the terms of the exergy balance as well as chemical, thermomechanical and thermochemical exergies for the control volume that includes the gases in the engine cylinder are determined. Examples of application of these models are presented in this work.

Conteúdo

1	Introdução.	1
2	Propriedades Termodinâmicas do Fluido de Trabalho	4
2.1	Introdução.	4
2.2	As Hipóteses.	6
2.3	As Propriedades de Cada Substância.	8
2.4	A Composição dos Gases de Combustão.	8
2.4.1	O Sistema de Equações.	8
2.4.2	Solução do Sistema de Equações.	12
2.4.3	Estimativa Inicial das Frações Molares.	14
2.4.4	As Derivadas das Frações Molares.	16
2.5	As Propriedades da Mistura de Gases.	16
2.6	Comentários Adicionais.	18
3	Processos nos Cilindros	19
3.1	Introdução.	19
3.2	A Análise pela Primeira Lei da Termodinâmica.	21
3.2.1	O Modelo Preditivo.	22
3.2.2	O Modelo de Diagnose.	26
3.3	A Transferência de Calor às Paredes do Cilindro.	27
3.4	A Taxa Aparente de Liberação de Energia.	31
3.5	A Análise Exergética no Cilindro do Motor.	34
3.5.1	Introdução.	34
3.5.2	O Conceito de Exergia.	35
3.5.3	A Exergia Química e Termomecânica.	36
3.5.4	O Balanço de Exergia.	37

4	Análise do Escoamento nos Dutos de Admissão e Escape	40
4.1	Introdução.	40
4.2	As Equações Governantes.	43
4.2.1	Balanço de Massa.	44
4.2.2	Balanço de Quantidade de Movimento.	45
4.2.3	Balanço de Energia.	46
4.3	A Natureza Hiperbólica do Problema.	48
4.4	As Equações das Curvas Características.	50
4.4.1	Adimensionalização das Equações.	52
4.4.2	As Variáveis de Riemann.	53
4.4.3	A Variável Nível de Entropia.	54
4.5	A Transferência de Calor às Paredes dos Dutos.	56
4.6	As Condições de Contorno.	57
4.6.1	Saída de Gás do Duto Através de uma Válvula.	58
4.6.2	Entrada de Gás ao Duto Através de uma Válvula.	60
4.6.3	Escoamento Através de um Extremo Livre.	62
5	O Algoritmo de Cálculo	65
5.1	Introdução.	65
5.2	Solução das Equações no Cilindro.	65
5.2.1	As Propriedades do Combustível.	66
5.3	Solução das Equações nos Dutos de Admissão e Escape.	67
5.3.1	A Malha de Cálculo.	67
5.3.2	As Condições de Referência.	69
5.3.3	O Nível de Entropia no Final do Passo de Integração.	69
5.3.4	As Variáveis de Riemann no Final do Passo de Integração.	72
5.3.5	Cálculo das Variáveis de Riemann nos Extremos do Duto.	77
6	Alguns Cálculos e Resultados	82
6.1	Resultados Obtidos com o Modelo de Diagnose.	82
6.2	Resultados Obtidos com o Modelo Preditivo.	93
6.2.1	O Caso Simulado.	93
7	Conclusões	114

A	Equações Para o Cálculo das Frações Molares e suas Derivadas	126
A.1	Cálculo das Frações Molares.	126
A.2	Cálculo das Derivadas das Frações Molares.	128
B	Relações Geométricas no Cilindro.	136
B.1	Deslocamento do Pistão.	136
B.2	Volume do Cilindro.	137
B.3	Área Lateral do Cilindro.	138
C	Determinação da Área Mínima de Escoamento na Válvula.	139
C.1	A Elevação Instantânea da Válvula.	146
D	Análise da Composição dos Produtos de Combustão	148

Lista de Figuras

2.1	Constantes de Equilíbrio das Reações de Dissociação de H_2O ($1/K_{p9}$) e CO_2 ($1/K_{p10}$)	15
3.1	O volume de controle no cilindro do motor.	22
3.2	A taxa de queima de combustível típica nos motores diesel.	32
4.1	Volume de controle para análise do escoamento.	44
4.2	Forças que atuam sobre a superfície de controle.	45
4.3	Escoamento através de uma válvula ou bocal redutor.	58
4.4	Escoamento através de um extremo livre do duto.	63
5.1	A malha de cálculo.	68
5.2	Interseção de linhas de trajetória.	70
5.3	Restituição do número de linhas de trajetória.	70
5.4	Geração de duas linhas de trajetória no caso de mudança na direção do escoamento.	71
5.5	Exclusão de uma partícula.	72
5.6	Definição do ponto P	73
5.7	Domínio de localização do ponto P	74
5.8	Determinação do posição do ponto P	75
5.9	Interpolação de valores no modelo.	76
5.10	Curvas características nos extremos do duto.	77
6.1	Diagrama de pressão obtido experimentalmente.	84
6.2	Ajuste da curva de pressão usando-se polinômios.	85
6.3	Ajuste da derivada da pressão usando-se polinômios.	85
6.4	As curvas de pressão ajustadas.	86
6.5	A taxa de queima de combustível — Ensaio 2.	87

6.6	A temperatura dos gases durante a combustão.	88
6.7	A taxa de queima de combustível — Ensaio 1, 2 e 3.	89
6.8	As exergias termoquímica, química e termomecânica — Ensaio 2.	89
6.9	Os termos do balanço de exergia — Ensaio 2.	90
6.10	A taxa de destruição de exergia.	90
6.11	A fração (instantânea) de exergia do combustível destruída por irreversibilidades.	91
6.12	A eficiência termodinâmica instantânea da combustão.	92
6.13	A eficiência termodinâmica instantânea da combustão em função da temperatura.	92
6.14	O diagrama p - V	96
6.15	A temperatura dos gases no cilindro.	97
6.16	A taxa de queima de combustível.	97
6.17	A taxa de transferência de calor.	98
6.18	A pressão no duto de admissão.	99
6.19	A temperatura no duto de admissão.	99
6.20	A pressão no extremo da válvula de admissão e no cilindro, em função do ângulo após o início da admissão.	100
6.21	A pressão no duto de escape.	101
6.22	A temperatura no duto de escape.	101
6.23	O fluxo de massa através das válvulas.	102
6.24	O número de Mach na seção de área mínima das válvulas.	103
6.25	Os termos do balanço de exergia durante a admissão.	103
6.26	A pressão no cilindro durante a admissão.	104
6.27	A área efetiva de passagem através da válvula de admissão.	105
6.28	As exergias termoquímica e química durante a admissão.	106
6.29	A exergia termoquímica por unidade de massa durante a admissão.	106
6.30	Os termos do balanço de exergia durante a compressão.	107
6.31	A taxa de produção de trabalho pelos gases no cilindro durante a compressão.	107
6.32	As exergias termoquímica e química durante o processo de compressão.	108
6.33	Os termos do balanço de exergia durante os processos de combustão e expansão.	109

6.34	A eficiência termodinâmica instantânea da combustão.	109
6.35	A eficiência termodinâmica instantânea da combustão em função da temperatura.	110
6.36	As exergias termoquímica e química durante os processos de combustão e expansão.	110
6.37	Os termos do balanço de exergia durante o processo de exaustão.	111
6.38	As exergias termoquímica e química durante a exaustão.	111
6.39	A exergia total por unidade de massa durante a exaustão.	112
B.1	Esquema do mecanismo biela-manivela.	136
C.1	Coefficiente de redução da área transversal em função da elevação adimensional.	140
C.2	Geometria da válvula.	141
C.3	Posição da válvula correspondente à elevação y_{lim}	141
C.4	Localização da seção de área mínima para elevações menores que y_{lim}	142
C.5	Localização da seção de área mínima para elevações maiores que y_{lim} segundo Laforgia.	143
C.6	Localização da seção de área mínima para elevações maiores que y_{lim} segundo Kastner.	144
C.7	Localização da seção A_{2b}	144
C.8	Comparação da área geométrica mínima computada segundo Laforgia, Kastner e este trabalho.	146
C.9	Modelo parabólico de elevação da válvula.	147
D.1	Fração molar de CO_2 — $p = 1$ bar.	149
D.2	Fração molar de CO_2 — $p = 50$ bar.	149
D.3	Fração molar de CO — $p = 1$ bar.	150
D.4	Fração molar de CO — $p = 50$ bar.	150
D.5	Fração molar de H_2O — $p = 1$ bar.	151
D.6	Fração molar de H_2O — $p = 50$ bar.	151
D.7	Fração molar de H_2 — $p = 1$ bar.	152
D.8	Fração molar de H_2 — $p = 50$ bar.	152
D.9	Fração molar de OH — $p = 1$ bar.	153
D.10	Fração molar de OH — $p = 50$ bar.	153

D.11 Fração molar de H — $p = 1$ bar.	154
D.12 Fração molar de H — $p = 50$ bar.	154
D.13 Fração molar de N_2 — $p = 1$ bar.	155
D.14 Fração molar de N_2 — $p = 50$ bar.	155
D.15 Fração molar de N — $p = 1$ bar.	156
D.16 Fração molar de N — $p = 50$ bar.	156
D.17 Fração molar de NO — $p = 1$ bar.	157
D.18 Fração molar de NO — $p = 50$ bar.	157
D.19 Fração molar de O — $p = 1$ bar.	158
D.20 Fração molar de O — $p = 50$ bar.	158
D.21 Fração molar de O_2 — $p = 1$ bar.	159
D.22 Fração molar de O_2 — $p = 50$ bar.	159
D.23 Fração molar de Ar — $p = 1$ bar.	160
D.24 Fração molar de Ar — $p = 50$ bar.	160

Lista de Tabelas

5.1	Propriedades do combustível <i>Diesel T-T</i>	67
6.1	Dados do modelo de diagnose.	83
6.2	Dados do modelo preditivo.	94
6.3	Resultados do balanço de energia por ciclo.	112
6.4	Resultados do balanço de exergia por ciclo.	113
6.5	Valores percentuais da distribuição de energia e exergia.	113
6.6	Resultados globais da simulação.	113
C.1	Dimensões da válvula.	145
D.1	Composição do ar.	148

Simbologia

Letras Latinas

A	Área
C_p	Calor específico a pressão constante
C_v	Calor específico a volume constante
c	Velocidade do som
c_A	Nível de entropia
c_f	Calor específico do combustível (líquido)
D	Diâmetro
Ex	Exergia
Ex_f	Exergia de escoamento
FA	Relação mássica combustível-ar
FA_s	Relação mássica combustível-ar na mistura estequiométrica
f	Coefficiente de atrito
G	Energia livre de Gibbs
H	Entalpia
I	Irreversibilidade
K_p	Constante de equilíbrio químico
k	Relação de calores específicos C_p/C_v
M	Massa molecular
m	Massa
N	Número de moles
Nu	Número de Nusselt
n	Frequência de rotação do eixo do motor
p	Pressão
PCI	Poder calorífico inferior do combustível
Q	Calor transmitido
R	Constante de um gás ideal
Re	Número de Reynolds
S	Entropia
T	Temperatura absoluta
T_w	Temperatura de parede
t	Tempo
U	Energia interna
V	Volume

W	Trabalho
w	Velocidade
w_p	Velocidade média do pistão
x	Fração molar
y	Elevação instantânea da válvula
z	Coordenada espacial

Letras Gregas

β	Variável de Riemann
ϵ	Taxa de compressão
θ	Ângulo de manivela
κ	Condutibilidade térmica
λ	Variável de Riemann
μ	Potencial químico
μ	Viscosidade dinâmica
ν	Coefficiente estequiométrico de uma reação
ρ	Densidade
σ	Geração de entropia
ϕ	Relação de equivalência combustível-ar
ψ	Relação das áreas na seção de garganta e no extremo do duto

Variáveis termodinâmicas específicas (por unidade de massa), são simbolizadas com letras minúsculas.

Capítulo 1

Introdução.

Os motores de combustão interna surgiram já na segunda metade do século passado e atualmente pode-se dizer que eles se constituíram nos equipamentos térmicos mais utilizados para produzir trabalho. Este visível sucesso se deve em parte à sua relativa simplicidade de projeto e elevada confiabilidade de operação, mas principalmente ao fato de serem dentre as máquinas térmicas, as que possuem as maiores eficiências de Primeira Lei que, no caso dos motores de ciclo diesel, podem chegar a 50% [1]. Uma vez que não há um sério concorrente capaz de substituí-los com vantagens, pode-se afirmar que em um futuro imediato, os motores de combustão interna e em especial os de ciclo diesel, deverão ser cada vez mais utilizados. Daí a importância e a conveniência de se continuar realizando pesquisas que visem o aperfeiçoamento dos motores, a partir de uma melhor compreensão dos fenômenos envolvidos nos processos que integram o seu ciclo de trabalho.

Há mais de um século que os fenômenos relacionados aos processos de trabalho dos motores vêm sendo estudados e, apesar dos enormes avanços conseguidos até a atualidade, deve-se reconhecer que há ainda muito o que aprender e pesquisar para se chegar a um nível de conhecimento satisfatório em relação a esses fenômenos. Os trabalhos de Borman [2] e de Wood [3] são enfáticos em mostrar as áreas de pesquisa que requerem mais atenção por parte dos cientistas do ramo.

Sabe-se que os fenômenos envolvidos nos processos que conformam o ciclo de trabalho dos motores, são extremamente complexos. Esta complexidade esta associada principalmente ao fato que o processo de combustão ocorre em um espaço confinado entre fronteiras móveis e geometrias complicadas, onde as propriedades termodinâmicas e hidrodinâmicas do fluido operante variam intensamente no tempo e no espaço e, em alguns casos — caoticamente, dado o alto grau de turbulência do meio. Entretanto, as dificuldades longe de inibir, parecem incentivar os pesquisadores a trabalharem mais intensamente na tentativa de alcançar uma melhor compreensão desses fenômenos. Além disso, o aumento das restrições impostas pela legislação que limita a emissão de substâncias poluentes, também tem favorecido a intensificação das atividades de pesquisa rela-

cionadas aos motores de combustão interna. Assim, hoje em dia é indispensável dispor de ferramentas cada vez mais sofisticadas e mais elaboradas para se conseguir novos avanços nesta área.

Felizmente a capacidade de processamento dos computadores digitais tem evoluído constantemente, e isto tem permitido a utilização de sofisticados modelos computacionais nos quais as equações de conservação de massa, energia, quantidade de movimento e espécies químicas são resolvidas levando-se em conta a natureza multidimensional dos fenômenos envolvidos. Na atualidade, este tipo de abordagem tem se constituído em uma promissória linha de pesquisa que passa por um período de intensa atividade, principalmente nos países onde há centros de pesquisas com vasta experiência na área de motores, onde a disponibilidade de avançadas técnicas experimentais, permite verificar a adequação dos modelos em um grau de detalhes compatível com as informações que estes modelos podem fornecer. Obviamente este entusiasmo em relação aos modelos multidimensionais é o reflexo do seu enorme potencial para explicar detalhadamente os complexos fenômenos que ocorrem nos cilindros dos motores.

Uma abordagem alternativa e que merece destaque, consiste na utilização de avançados conceitos e métodos de análise, aliados a formas clássicas de modelamento. É nesta direção que aponta o presente trabalho, cujo objetivo se concentra na elaboração de modelos termodinâmicos que permitam simular os processos que conformam o ciclo de trabalho do motor diesel, e que incorporem os conceitos e os procedimentos próprios do método exergético de análise termodinâmica. Assim, os modelos de simulação desenvolvidos neste trabalho levam em consideração os efeitos da velocidade finita de combustão, a transmissão de calor instantânea às paredes, a variação da composição química do fluido de trabalho, bem como os fenômenos relacionados à propagação de ondas nos dutos de admissão e escape.

Para construir estes modelos de simulação, em um primeiro estágio do trabalho foi desenvolvida uma rotina que possibilita o cálculo das propriedades termodinâmicas do fluido operante, e das derivadas destas propriedades em relação a variáveis que definem o estado termodinâmico do sistema (neste caso — a pressão, a temperatura e a relação combustível-ar). As hipóteses adotadas e as equações utilizadas nestes cálculos são descritas de forma detalhada no Capítulo 2.

No Capítulo 3 são abordados os diferentes processos que ocorrem no cilindro do motor, enfatizando-se a liberação de energia durante a combustão e a transferência de calor às paredes do cilindro. Os conceitos de exergia termomecânica, química e termoquímica também são discutidos neste capítulo. Além disso, é deduzida a equação que expressa o balanço de exergia para o volume de controle que inclui os gases no cilindro. Nesta equação foram considerados separadamente a destruição de exergia por irreversibilidades dentro do sistema e os fluxos de exergia que atravessam a superfície de controle, estes associados aos escoamentos através das válvulas de admissão e escape, à entrada de

combustível através do bico injetor, à transferência de calor e à produção de trabalho.

No Capítulo 4 são deduzidas as equações que governam o escoamento em regime transitório de um fluido compressível, como ocorre nos dutos de admissão e escape. Nestas equações foram incluídos os efeitos da variação da seção transversal dos dutos, da transferência de calor e do atrito nas paredes. Especial atenção foi dispensada à demonstração da natureza hiperbólica do problema e à fundamentação matemática do Método das Características, adotado para resolver as equações governantes.

No Capítulo 5 são detalhados os procedimentos utilizados para se resolver as equações governantes e são descritos os modelos de diagnose e preditivo desenvolvidos durante este trabalho.

O Capítulo 6 apresenta alguns resultados obtidos com os modelos construídos. O modelo de diagnose foi aplicado para analisar o processo de combustão de um motor diesel turboalimentado de injeção direta, ensaiado em bancada nas condições de plena carga. Já o modelo preditivo foi utilizado para simular o ciclo completo de um motor hipotético de injeção direta e aspiração natural. Os resultados são discutidos detalhadamente, enfatizando-se as causas que originam a destruição de exergia.

As conclusões do trabalho são apresentadas no Capítulo 7.

Capítulo 2

Propriedades Termodinâmicas do Fluido de Trabalho

2.1 Introdução.

A modelagem matemática do ciclo de trabalho dos motores de combustão interna inclui necessariamente a verificação da Primeira Lei da Termodinâmica para um ou mais volumes de controle contendo o fluido de trabalho, daí a necessidade de se determinar as propriedades deste fluido.

Diversas têm sido as estratégias utilizadas ao longo dos anos para o cálculo das propriedades do fluido de trabalho. Os primeiros modelos que tentam descrever os processos termodinâmicos que ocorrem nos cilindros dos motores, baseiam-se nos chamados *ciclos padrão a ar*, nos quais admite-se que o fluido de trabalho é constituído por uma massa de ar que permanece constantemente no cilindro e que recebe calor de uma fonte externa, simulando desta forma o processo de combustão que ocorre nos motores reais. Considera-se que este fornecimento de calor pode ocorrer a volume constante (ciclo Otto), a pressão constante (ciclo Diesel) ou em uma combinação desses dois (ciclo Sabathé) [4, 5, 6]. Os ciclos padrão a ar, que inicialmente consideravam o fluido de trabalho como sendo um gás perfeito, com o tempo passaram a levar em conta a dependência das propriedades termodinâmicas em relação à temperatura.

A necessidade de se obter maiores informações além daquelas que os ciclos padrão a ar podem fornecer, deu origem aos chamados *ciclos ar-combustível*, nos quais se introduz a idéia de um fluido de trabalho cuja composição química muda como resultado da combustão. Nesses modelos, as propriedades do fluido de trabalho são calculadas com ajuda das chamadas *cartas de propriedades* [7, 8, 9], construídas considerando-se que os gases constituintes se comportam como gases ideais e admitindo-se que a composição da mistura é determinada pelo equilíbrio químico entre as espécies. Além disso, as hipóteses de combustão a volume constante ou a pressão constante, inerentes aos ciclos ideais Otto e Diesel, ainda foram mantidas nesses modelos [10].

O advento dos computadores digitais tornou possível a concepção de modelos mais realísticos, assim surgiram os modelos termodinâmicos que incluem o tempo como uma variável explícita e, posteriormente, os modelos multidimensionais. Neles leva-se em consideração o fato que nos motores reais não se tem transferência de calor intencionada e que o fluido de trabalho é constituído, em geral, por uma mistura de ar, combustível e produtos de combustão [11, 12]. As cartas de propriedades são então substituídas por códigos de computador, desenvolvidos de forma tal que é possível efetuar os cálculos para combustíveis de variadas composições [13, 14], e resolver as equações de cinética química [15, 16].

De fato, a composição do fluido de trabalho contido no cilindro do motor, varia no tempo e no espaço. No início da compressão, no caso do motor diesel, este fluido é composto por uma mistura de ar, aspirado durante o processo de admissão, e produtos de combustão remanescentes do ciclo anterior. Quando o pistão se aproxima do *ponto morto superior* (PMS), um jato de combustível atomizado é introduzido na câmara de combustão através do bico injetor. A partir desse momento, no cilindro tem-se uma mistura de ar, produtos de combustão (gases residuais) e combustível. Este último em fases líquida (na forma de gotículas) e gasosa (resultante da vaporização das gotículas). Quando as condições locais de temperatura, pressão e relação ar-combustível são propícias, o contato dos vapores de combustível com o oxigênio do ar dá origem à formação de focos de auto-ignição, a partir dos quais se desenvolve a combustão.

O estado dos conhecimentos atuais não permite fazer uma avaliação precisa das substâncias formadas durante a combustão. As reações químicas associadas a este processo são bastante complexas e ainda não são totalmente conhecidas. Sabe-se que são do tipo de reações em cadeia que apresentam múltiplas ramificações nas quais são formadas substâncias quimicamente ativas (radicais ativos) que interagem entre si e com as moléculas presentes no ar e no combustível, dando origem a novos radicais ativos [17]. A formação de radicais ativos ocorre em progressão geométrica o que determina que o processo evolua a velocidades elevadas. Na medida em que a combustão avança, o ar e os vapores de combustível que participam dela vão sendo transformados em produtos de combustão.

A rigor, o cálculo das propriedades do fluido de trabalho implica na identificação qualitativa e quantitativa das espécies químicas que são formadas e decompostas a cada instante e em cada ponto do espaço dentro do cilindro. Dada a complexidade dos fenômenos descritos, que aliás ocorrem num meio altamente turbulento, torna-se indispensável recorrer a hipóteses simplificadoras para se resolver o problema. Na seção seguinte estas hipóteses são apresentadas e discutidas à luz dos objetivos desta tese.

2.2 As Hipóteses.

Neste trabalho é considerado que o fluido de trabalho corresponde às condições do modelo de uma zona de combustão como enunciado por Krieger e Borman [12], no qual admite-se que a mistura de gases contida no cilindro é homogênea, se comporta como uma mistura de gases ideais em equilíbrio termodinâmico, e é composta por ar e produtos de combustão. Como consequência destas hipóteses, pode-se inferir que fenômenos tais como gradientes de temperatura, ondas de pressão, composição em não-equilíbrio, atomização e vaporização de combustível, atraso da ignição, etc. devem ser ignorados.

É preciso reconhecer que a partir do momento que o combustível ingressa na câmara de combustão o fluido de trabalho é de fato heterogêneo, apresentando regiões onde existe apenas combustível (tanto líquido como vapor), regiões que contém só ar e resíduos do ciclo anterior, regiões onde os vapores de combustível se misturam com ar e gases residuais em diversas proporções, e regiões onde já ocorreu a combustão, contendo portanto apenas produtos. Embora diversos trabalhos tenham mostrado que o tempo necessário para a vaporização do combustível é pequeno o suficiente para não se levar em conta a presença da fase líquida [18, 19], ainda é preciso considerar a distribuição espacial da relação ar-combustível dentro da câmara de combustão para poder avaliar com certa precisão, a composição da mistura de gases que resulta da combustão. Este requisito é particularmente importante quando se deseja estimar a quantidade de gases poluentes que serão emitidos pelo motor, para o que torna-se indispensável recorrer a modelos quase e multi-dimensionais. No entanto, quando o objetivo se concentra na avaliação dos índices de eficiência e desempenho, e no estudo da dependência destes índices em relação às condições operacionais e a alguns parâmetros geométricos do motor, como é o caso deste trabalho, a determinação da composição química do fluido de trabalho deixa de ser um fim e se torna um meio que permite o cálculo das variáveis termodinâmicas. Para estes casos, a hipótese de homogeneidade pode garantir resultados bastante próximos daqueles verificados em ensaios experimentais, como é mostrado nas referências [11, 20, 21]. Ainda em defesa desta hipótese, Kumar *et alii* [22] mencionam que ela pode ser considerada representativa das condições verificadas nos motores que operam a altas rotações, nos quais o elevado grau de turbilhonamento no cilindro (*swirl*) garante que os gases se misturem intensamente.

A hipótese de mistura de gases ideais encontra justificativa no trabalho de Zacharias [23], que utilizou uma forma modificada da equação de estado de Beattie-Bridgeman (incluindo até o segundo coeficiente virial) para calcular as propriedades dos produtos de combustão. Os resultados por ele obtidos mostram que para a faixa de pressões e temperaturas em que operam os motores de combustão interna, o fator de compressibilidade é essencialmente unitário.

Quanto à hipótese de equilíbrio químico, ela pode ser adotada baseando-se no fato que, para a maior parte das reações químicas envolvidas no

processo de combustão, as velocidades de reação são extremamente altas [7], o que determina que o tempo necessário para atingir o equilíbrio seja de ordem de grandeza inferior ao passo temporal adotado no modelamento (este último tipicamente da ordem de 10^{-5} segundos). Os óxidos de nitrogênio e o monóxido de carbono, que são gases poluentes, constituem uma exceção a esta afirmação. Spadaccini [24] afirma que estes gases são formados rapidamente durante a parte da combustão quando a temperatura média na câmara se aproxima do seu valor máximo, atingindo concentrações próximas às de equilíbrio. Posteriormente, quando a temperatura no cilindro cai, estas substâncias tendem a se decompor, diminuindo as suas concentrações. Se a hipótese de equilíbrio químico fosse válida, esta decomposição ocorreria mantendo-se as concentrações de equilíbrio. No entanto, estas reações são tão lentas que no final do processo de exaustão as frações molares destes componentes são maiores que as de equilíbrio em varias ordens de grandeza. Isto demonstra que, quando se estabelece como objetivo o estudo da emissão de gases poluentes, as equações que governam a cinética das reações químicas necessariamente devem ser levadas em consideração [15, 16, 24, 25].

Um outro aspecto importante no cálculo das propriedades termodinâmicas do fluido de trabalho refere-se às substâncias que devem ser consideradas componentes dos produtos de combustão. Quanto a isto, deve-se ter presente que a determinação da composição química do fluido de trabalho é necessária para o cálculo das propriedades termodinâmicas, mas não constitui um objetivo em si para este trabalho. De outro lado, desde que as propriedades da mistura dependem em maior grau das substâncias que se encontram em maiores concentrações molares, é possível limitar o número de substâncias consideradas presentes na mistura de gases às espécies que se encontram em concentrações significativas. Deve-se lembrar que as propriedades da mistura de gases ideais são calculadas a partir da soma ponderada das propriedades de cada um dos componentes, onde o fator de ponderação é a fração molar. Obviamente, quanto maior o número de substâncias consideradas, tanto maior será a precisão no cálculo.

Considerando-se a intenção de no futuro modificar a rotina de cálculo de propriedades de forma tal a incluir os mecanismos de formação de substâncias poluentes, e levando-se em conta dados reportados na literatura [7, 9, 13, 14, 26], achou-se conveniente considerar que os produtos da combustão são constituídos pelas seguintes substâncias

- | | | |
|----------|----------|------------|
| 1. H | 5. OH | 9. H_2O |
| 2. O | 6. CO | 10. CO_2 |
| 3. N | 7. NO | 11. N_2 |
| 4. H_2 | 8. O_2 | 12. Ar |

2.3 As Propriedades de Cada Substância.

Para o cálculo das propriedades de cada gás presente entre os produtos da combustão, tomou-se como base os dados das tabelas da JANAF [27], reconhecida-mente uma das mais citadas fontes no cálculo de propriedades termodinâmicas [8, 13, 28, 29]. A partir desses dados, Gallo [29] tem ajustado dois polinômios de quinto grau para o calor específico molar a pressão constante (\bar{C}_p) de cada gás — o primeiro para o intervalo de temperaturas de 200 a 1500 K, e o segundo de 1500 a 6000 K. Esses polinômios são utilizados para calcular a entalpia absoluta molar (\bar{h}), a entropia absoluta molar (\bar{s}) e a energia livre de Gibbs molar (\bar{g}) de cada gás, pelas seguintes expressões

$$\bar{h}_i(T) = \bar{h}_i(T_0) + \int_{T_0}^T \bar{C}_p dT$$

$$\bar{s}_i(T, p) = \bar{s}_i(T_0, p_0) + \int_{T_0}^T \frac{\bar{C}_p}{T} dT - \bar{R} \ln \left(\frac{p}{p_0} \right)$$

$$\bar{g}_i(T, p) = \bar{h}_i(T) - T \bar{s}_i(T, p)$$

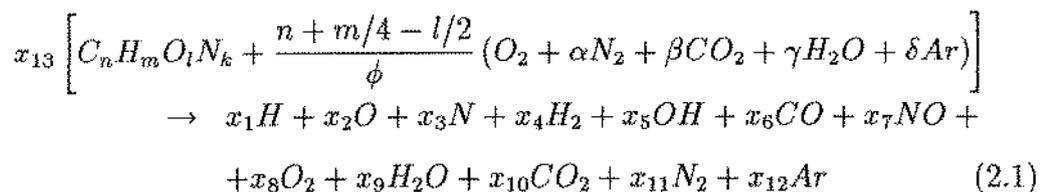
onde

- T_0 — temperatura de referência, igual a 200 K para a faixa de temperaturas de 200 a 1500 K, e 1500 para o intervalo de 1500 a 6000 K;
- p_0 — pressão de referência igual a 1 atm;
- $\bar{h}_i(T)$ — entalpia absoluta (base molar) da substância i , à temperatura T . Inclui-se a entalpia de formação a 0 K e a diferença de calor sensível entre T e 0 K;
- $\bar{s}_i(T, p)$ — entropia absoluta molar;
- \bar{R} — constante universal dos gases ideais.

2.4 A Composição dos Gases de Combustão.

2.4.1 O Sistema de Equações.

A combustão, em presença de ar, de um hidrocarboneto que contém na sua estrutura molecular átomos de carbono (C), hidrogênio (H), oxigênio (O) e nitrogênio (N) pode ser representada pela seguinte equação



onde

- n, m, l, k – número de átomos de C, H, O e N respectivamente, na molécula do hidrocarboneto (no caso de uma substância pura) ou na sua fórmula empírica (no caso de um combustível comercial);
- ϕ – taxa de equivalência combustível-ar, definida como a relação real combustível-ar dividida pela relação estequiométrica;
- x_1, \dots, x_{12} – frações molares das espécies químicas constituintes dos produtos da combustão;
- x_{13} – número de moles de combustível, necessário para produzir um mol de produtos;
- $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ – número de moles de N_2, CO_2, H_2O e Ar , presentes no ar para cada mol de O_2 .

A questão a ser resolvida consiste em se determinar x_1, x_2, \dots, x_{13} , conhecendo-se a taxa de equivalência (ϕ) e as condições de pressão (p) e temperatura (T) em que se encontra a mistura de gases que resultam da combustão. Para isto, são necessárias treze equações independentes que virão formar um sistema totalmente determinado.

A primeira relação a ser considerada resulta da definição do conceito de fração molar, de acordo com a qual a soma das frações molares de todos os componentes deve ser igual a um

$$\sum_{i=1}^{12} x_i = 1 \quad (2.2)$$

A partir do balanço de átomos de C, H, O, N e Ar , respectivamente, obtém-se as seguintes equações

$$x_6 + x_{10} = n' x_{13} \quad (2.3)$$

$$x_1 + 2x_4 + x_5 + 2x_9 = m' x_{13} \quad (2.4)$$

$$x_2 + x_5 + x_6 + x_7 + 2x_8 + x_9 + 2x_{10} = 2r x_{13} \quad (2.5)$$

$$x_3 + x_7 + 2x_{11} = 2r' x_{13} \quad (2.6)$$

$$x_{12} = r'' x_{13} \quad (2.7)$$

onde

$$n' = n + \beta r_0$$

$$m' = m + 2\gamma r_0$$

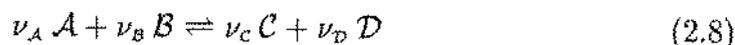
$$r = \frac{l}{2} + r_0 \left(1 + \beta + \frac{\gamma}{2}\right)$$

$$r' = \frac{k}{2} + \alpha r_0$$

$$r'' = \delta r_0$$

$$r_0 = \frac{n + m/4 - l/2}{\phi}$$

As sete equações restantes podem ser obtidas a partir da *lei de ação de massas* escrita para as reações que mantêm a mistura de gases no estado de equilíbrio químico. Para uma reação do tipo



a lei de ação de massas tem a seguinte forma [26]

$$K_p = \frac{x_C^{\nu_C} x_D^{\nu_D}}{x_A^{\nu_A} x_B^{\nu_B}} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\nu_C + \nu_D - \nu_A - \nu_B} \quad (2.9)$$

onde K_p é a constante de equilíbrio químico, definida através da seguinte expressão [30]

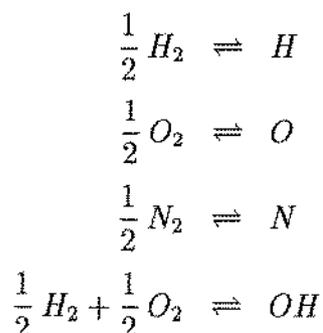
$$\ln K_p = -\frac{\Delta G^0}{RT} \quad (2.10)$$

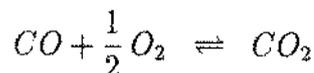
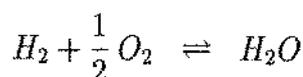
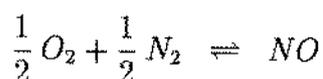
Nesta equação ΔG^0 é a energia livre de Gibbs associada à reação. Ela é obtida a partir da energia livre de Gibbs na base molar dos produtos e reagentes (\bar{g}_i), de forma análoga à entalpia da reação. Assim, para a reação dada pela Equação 2.8 pode-se escrever

$$\Delta G^0 = \nu_C \bar{g}_C(T, p_0) + \nu_D \bar{g}_D(T, p_0) - \nu_A \bar{g}_A(T, p_0) - \nu_B \bar{g}_B(T, p_0) \quad (2.11)$$

Para o conjunto de doze espécies químicas, consideradas neste trabalho, pode-se estabelecer mais de sete reações de equilíbrio; no entanto, apenas sete desse conjunto são independentes. As outras equações possíveis resultam da combinação linear dessas. Em princípio, é irrelevante a questão quais entre todas as possíveis reações serão escolhidas para completar o sistema de equações, a única condição a ser cumprida é que elas não sejam redundantes [30]. Assim, pode-se optar pelo conjunto de equações mais simples possível, o que virá facilitar os cálculos futuramente.

Para garantir que as equações de equilíbrio sejam independentes, foram consideradas as reações nas quais as substâncias se formam a partir dos elementos na sua *forma padrão*. Na referência [27] define-se H_2 como a forma padrão do hidrogênio, O_2 para o oxigênio, N_2 para o nitrogênio e $C_{(s)}$ para o carbono. Uma vez, que o carbono sólido não consta na lista dos produtos da combustão considerados, admite-se aqui que a forma padrão do carbono é o monóxido de carbono (CO). Assim, chega-se ao seguinte conjunto de reações





Do lado direito de todas estas equações aparece uma das substâncias listadas na página 7. Isto permite identificar as constantes de equilíbrio de cada reação pelo número correspondente à dita substância. Dessa forma, a lei de ação de massas para estas reações resulta

$$K_{p1} = \frac{x_1}{\sqrt{x_4}} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.12)$$

$$K_{p2} = \frac{x_2}{\sqrt{x_8}} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.13)$$

$$K_{p3} = \frac{x_3}{\sqrt{x_{11}}} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.14)$$

$$K_{p5} = \frac{x_5}{\sqrt{x_4} \sqrt{x_8}} \quad (2.15)$$

$$K_{p7} = \frac{x_7}{\sqrt{x_8} \sqrt{x_{11}}} \quad (2.16)$$

$$K_{p9} = \frac{x_9}{x_4 \sqrt{x_8}} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (2.17)$$

$$K_{p10} = \frac{x_{10}}{x_6 \sqrt{x_8}} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (2.18)$$

onde, de acordo com as Equações 2.10 e 2.11,

$$\ln K_{p1} = -\frac{1}{RT} \left(\bar{g}_1(T, p_0) - \frac{1}{2} \bar{g}_4(T, p_0) \right)$$

$$\ln K_{p2} = -\frac{1}{RT} \left(\bar{g}_2(T, p_0) - \frac{1}{2} \bar{g}_8(T, p_0) \right)$$

$$\ln K_{p3} = -\frac{1}{RT} \left(\bar{g}_3(T, p_0) - \frac{1}{2} \bar{g}_{11}(T, p_0) \right)$$

$$\ln K_{p5} = -\frac{1}{RT} \left(\bar{g}_5(T, p_0) - \frac{1}{2} \bar{g}_4(T, p_0) - \frac{1}{2} \bar{g}_8(T, p_0) \right)$$

$$\ln K_{p7} = -\frac{1}{RT} \left(\bar{g}_7(T, p_0) - \frac{1}{2} \bar{g}_8(T, p_0) - \frac{1}{2} \bar{g}_{11}(T, p_0) \right)$$

$$\ln K_{p9} = -\frac{1}{RT} \left(\bar{g}_9(T, p_0) - \bar{g}_4(T, p_0) - \frac{1}{2} \bar{g}_8(T, p_0) \right)$$

$$\ln K_{p10} = -\frac{1}{RT} \left(\bar{g}_{10}(T, p_0) - \bar{g}_6(T, p_0) - \frac{1}{2} \bar{g}_8(T, p_0) \right)$$

As Equações 2.2-2.7 e 2.12-2.18 formam um sistema de equações não lineares, onde as incógnitas são x_1, x_2, \dots, x_{13} .

2.4.2 Solução do Sistema de Equações.

O sistema de treze equações não lineares pode ser reduzido a um sistema de duas equações através de manipulações algébricas, como será mostrado a seguir.

Sejam as variáveis C_i definidas para cada uma das reações de equilíbrio da seguinte maneira

$$C_1 = K_{p1} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

$$C_2 = K_{p2} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

$$C_3 = K_{p3} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

$$C_5 = K_{p5}$$

$$C_7 = K_{p7}$$

$$C_9 = K_{p9} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$C_{10} = K_{p10} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{1}{2}}$$

A partir das Equações 2.12, 2.15 e 2.17, pode-se eliminar as variáveis x_1 , x_5 e x_9 da Equação 2.4. A expressão resultante é uma equação quadrática em $\sqrt{x_4}$ cuja solução positiva é

$$\sqrt{x_4} = \frac{\sqrt{(C_1 + C_5\sqrt{x_8})^2 + 8m'x_{13}(1 + C_9\sqrt{x_8})} - (C_1 + C_5\sqrt{x_8})}{4(1 + C_9\sqrt{x_8})} \quad (2.19)$$

Das Equações 2.18 e 2.3 resulta

$$x_6 = \frac{n'x_{13}}{1 + C_{10}\sqrt{x_8}} \quad (2.20)$$

Eliminando x_3 e x_7 de 2.6 com ajuda das Equações 2.14 e 2.16, obtem-se

$$\sqrt{x_{11}} = \sqrt{\frac{1}{16} (C_3 + C_7\sqrt{x_8})^2 + r'x_{13}} - \frac{C_3 + C_7\sqrt{x_8}}{4} \quad (2.21)$$

A partir das Equações 2.12-2.18 e 2.7, pode-se eliminar as variáveis $x_1, x_2, x_3, x_5, x_7, x_9, x_{10}$, e x_{12} de 2.5 e 2.2. Assim resulta

$$\begin{aligned} &\sqrt{x_4}C_5\sqrt{x_8} + x_4C_9\sqrt{x_8} + x_6(1 + 2C_{10}\sqrt{x_8}) + \\ &\quad + \sqrt{x_{11}}C_7\sqrt{x_8} + C_2\sqrt{x_8} + 2x_8 - 2rx_{13} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\sqrt{x_4}(C_1 + C_5\sqrt{x_8}) + x_4(1 + C_9\sqrt{x_8}) + x_6(1 + C_{10}\sqrt{x_8}) + \\ &\quad + \sqrt{x_{11}}(C_3 + C_7\sqrt{x_8}) + x_{11} + C_2\sqrt{x_8} + x_8 + r''x_{13} - 1 = 0 \end{aligned}$$

Inserindo nestas equações as expressões para x_4, x_6 e x_{11} obtidas em 2.19, 2.20 e 2.21 respectivamente, chega-se a duas equações onde as incógnitas são x_8 e x_{13}

$$f_1(x_8, x_{13}) = 0 \quad (2.22)$$

$$f_2(x_8, x_{13}) = 0 \quad (2.23)$$

O problema a ser resolvido agora consiste em se determinar os valores de x_8 e x_{13} que satisfazem estas equações. Isto pode ser feito utilizando-se o método de Newton-Raphson [31], no qual a solução (x_8^*, x_{13}^*) é encontrada a partir de uma estimativa inicial da solução (x_8^0, x_{13}^0) que progressivamente é corrigida até convergir para a solução. As correções a serem aplicadas aos valores estimados da solução são determinadas expandindo-se as Equações 2.22 e 2.23 em series de Taylor e desprezando-se os termos que contém as derivadas segundas e de ordem superior. Assim obtém-se um sistema linear de duas equações

$$f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial x_8} \Delta x_8 + \frac{\partial f_1}{\partial x_{13}} \Delta x_{13} \approx 0 \quad (2.24)$$

$$f_2 + \frac{\partial f_2}{\partial x_8} \Delta x_8 + \frac{\partial f_2}{\partial x_{13}} \Delta x_{13} \approx 0 \quad (2.25)$$

onde $\Delta x_8 = x_8^1 - x_8^0$, $\Delta x_{13} = x_{13}^1 - x_{13}^0$ e as funções f_1, f_2 e as suas derivadas são calculadas no ponto (x_8^0, x_{13}^0) . A solução deste sistema de equações é

$$\Delta x_8 = \frac{f_2 \frac{\partial f_1}{\partial x_{13}} - f_1 \frac{\partial f_2}{\partial x_{13}}}{\frac{\partial f_1}{\partial x_8} \frac{\partial f_2}{\partial x_{13}} - \frac{\partial f_1}{\partial x_{13}} \frac{\partial f_2}{\partial x_8}}$$

$$\Delta x_{13} = \frac{f_1 \frac{\partial f_2}{\partial x_8} - f_2 \frac{\partial f_1}{\partial x_8}}{\frac{\partial f_1}{\partial x_8} \frac{\partial f_2}{\partial x_{13}} - \frac{\partial f_1}{\partial x_{13}} \frac{\partial f_2}{\partial x_8}}$$

Os valores (x_8^1, x_{13}^1) obtidos por este procedimento, representam uma melhor aproximação da solução (x_8^*, x_{13}^*) . O cálculo é repetido até que as correções Δx_8 e Δx_{13} se tornem inferiores a um valor pré-estabelecido. No Apêndice A são mostradas as equações utilizadas nestes cálculos.

2.4.3 Estimativa Inicial das Frações Molares.

Como mencionado anteriormente, o método de Newton-Raphson deve ser iniciado com uma estimativa da solução. Quanto mais próxima da solução a estimativa inicial, mais rápida será a convergência do processo iterativo. Por este motivo, neste trabalho tem-se adotado um procedimento bastante criterioso para a escolha dos valores iniciais de x_8 e x_{13} , atendendo ao fato que grande parte do tempo computacional é gasto na execução da sub-rotina de propriedades do fluido de trabalho (aproximadamente 25% do total no modelo de diagnose).

Quando a mistura combustível-ar é *pobre* ($\phi < 1$), espera-se que os produtos resultantes da oxidação completa predominem na composição da mistura de gases resultante. Por isso, pode-se considerar como boa aproximação, que os produtos da combustão contém apenas O_2 , H_2O , CO_2 , N_2 e Ar . A partir dos balanços atômicos e da condição que a somatória das frações molares deve ser igual a 1, obtém-se facilmente as seguintes correlações

$$x_8 \approx \frac{r - \frac{m'}{4} - n'}{\frac{m'}{4} + r + r' + r''}$$

$$x_{13} \approx \frac{1}{\frac{m'}{4} + r + r' + r''}$$

No caso de mistura *rica* ($\phi > 1$), quando o oxigênio do ar é insuficiente para oxidar todo o hidrogênio e o carbono contido no combustível, é preciso considerar, também, a presença de H_2 e CO . Assim, pode-se admitir que os produtos da combustão são H_2 , CO , O_2 , H_2O , CO_2 , N_2 e Ar . Neste caso, as equações da somatória das frações molares, dos balanços atômicos e da lei de ação de massas, resultam

$$x_4 + x_6 + x_8 + x_9 + x_{10} + x_{11} + x_{12} \approx 1$$

$$x_6 + x_{10} \approx n' x_{13}$$

$$x_4 + x_9 \approx \frac{m'}{2} x_{13}$$

$$x_6 + 2x_8 + x_9 + 2x_{10} \approx 2r x_{13}$$

$$x_{11} \approx r' x_{13}$$

$$x_{12} \approx r'' x_{13}$$

$$C_9 = \frac{x_9}{x_4 \sqrt{x_8}}$$

$$C_{10} = \frac{x_{10}}{x_6 \sqrt{x_8}}$$

Utilizando o mesmo procedimento da Seção 2.4.2 para reduzir o número de equações, obtém-se

$$x_8 + \left(\frac{m'}{2} + n' + r' + r'' \right) x_{13} \approx 1 \quad (2.26)$$

$$\frac{n' (1 + 2C_{10}\sqrt{x_8})}{1 + C_{10}\sqrt{x_8}} + \frac{\frac{m'}{2}C_9\sqrt{x_8}}{1 + C_9\sqrt{x_8}} + 2\frac{x_8}{x_{13}} - 2r \approx 0 \quad (2.27)$$

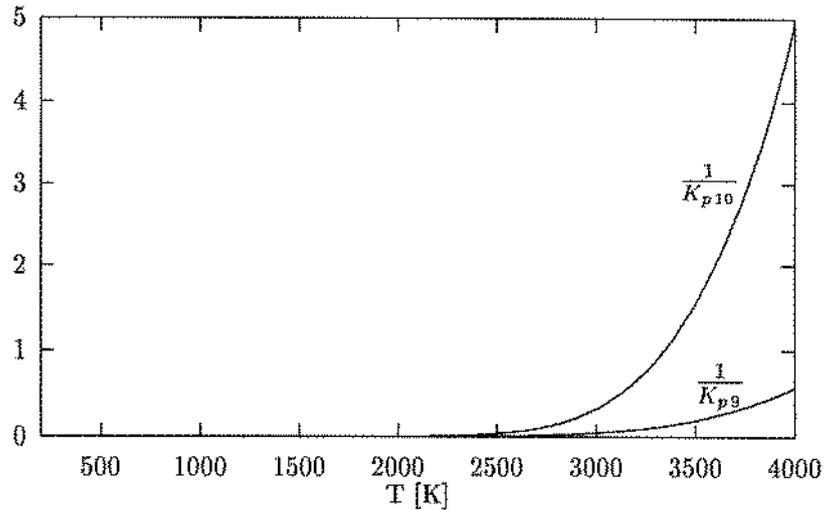


Figura 2.1: Constantes de Equilíbrio das Reações de Dissociação de H_2O ($1/K_{p9}$) e CO_2 ($1/K_{p10}$)

A partir das Equações 2.26 e 2.27 é possível obter uma equação onde a única incógnita é x_8 . No entanto, a solução dessa equação requer também uma estimativa do valor de x_8 , que é o problema original. Para contornar esta situação é preciso levar em conta que o oxigênio diatômico presente nos produtos de combustão provém principalmente da dissociação do dióxido de carbono e do vapor d'água. Assim sendo, ao analisar a Figura 2.1 pode-se verificar que até 2500 K a quantidade de O_2 produzida por dissociação é extremamente pequena. Neste caso, é possível desprezar o terceiro termo da Equação 2.27 e obter a seguinte expressão

$$x_8 \left[C_9 C_{10} \left(\frac{m'}{2} + 2n' - 2r \right) + \sqrt{x_8} \left[C_9 \left(\frac{m'}{2} + n' - 2r \right) + 2C_{10} (n' - r) \right] + [n' - 2r] \right] = 0$$

A raiz positiva desta equação quadrática em $\sqrt{x_8}$ proporciona uma boa estimativa da fração molar do oxigênio diatômico na mistura. O valor aproximado de x_{13} é determinado então usando-se a Equação 2.26.

Levando em conta o fato que raramente a temperatura média na câmara de combustão excede 2500 K, nenhuma tentativa foi feita no sentido de estimar com maior precisão o valor de x_8 para este caso. No entanto, deve-se mencionar que tem-se conseguido uma rápida convergência das Equações 2.22 e 2.23 iniciando os cálculos com $x_8 = 0.05$.

2.4.4 As Derivadas das Frações Molares.

A solução das equações da Primeira e Segunda Leis da Termodinâmica, na sua forma diferencial, requer que além das propriedades da mistura de gases, sejam conhecidas também as derivadas destas propriedades em relação às variáveis independentes (T, p, ϕ). Para calcular estas derivadas é necessário determinar, antes, as derivadas das frações molares das espécies constituintes da mistura. Isto pode ser feito a partir da diferenciação das Equações 2.22 e 2.23, assim, para o caso das derivadas em relação à temperatura, obtém-se

$$\frac{\partial f_1}{\partial T} + \frac{\partial f_1}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial T} + \frac{\partial f_1}{\partial x_{13}} \frac{\partial x_{13}}{\partial T} = 0 \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial T} + \frac{\partial f_2}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial T} + \frac{\partial f_2}{\partial x_{13}} \frac{\partial x_{13}}{\partial T} = 0 \quad (2.29)$$

Estas equações formam um sistema algébrico onde as incógnitas são $\partial x_8/\partial T$ e $\partial x_{13}/\partial T$. Note-se que a matriz de coeficientes é a mesma que a do sistema definido pelas Equações 2.24 e 2.25, cujos elementos são calculados durante a aplicação do método de Newton-Raphson. A solução destas equações resulta

$$\frac{\partial x_8}{\partial T} = \frac{\frac{\partial f_2}{\partial T} \frac{\partial f_1}{\partial x_{13}} - \frac{\partial f_1}{\partial T} \frac{\partial f_2}{\partial x_{13}}}{\frac{\partial f_1}{\partial x_8} \frac{\partial f_2}{\partial x_{13}} - \frac{\partial f_2}{\partial x_8} \frac{\partial f_1}{\partial x_{13}}}$$

$$\frac{\partial x_{13}}{\partial T} = \frac{\frac{\partial f_1}{\partial T} \frac{\partial f_2}{\partial x_8} - \frac{\partial f_2}{\partial T} \frac{\partial f_1}{\partial x_8}}{\frac{\partial f_1}{\partial x_8} \frac{\partial f_2}{\partial x_{13}} - \frac{\partial f_2}{\partial x_8} \frac{\partial f_1}{\partial x_{13}}}$$

A partir das derivadas das frações molares x_8 e x_{13} pode-se facilmente calcular as derivadas das outras frações molares.

De forma análoga são determinadas as derivadas em relação a p e ϕ . No Anexo A são apresentadas as equações utilizadas nos cálculos.

2.5 As Propriedades da Mistura de Gases.

Uma vez determinada a composição de equilíbrio, pode-se calcular o peso molecular médio (M), a constante (R), a entalpia (h), a entropia (s) e a energia interna (u) da mistura de gases pelas seguintes expressões

$$M = \sum_{i=1}^{12} x_i M_i$$

$$R = \frac{\bar{R}}{M}$$

$$h = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{12} x_i \bar{h}_i(T)$$

$$s = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{12} x_i \bar{s}_i(T, x_i p)$$

$$u = h - RT$$

As derivadas destas propriedades em relação a T , p , ϕ calculam-se a partir das derivadas das frações molares, assim

$$\frac{\partial M}{\partial T} = \sum_{i=1}^{12} M_i \frac{\partial x_i}{\partial T}$$

$$\frac{\partial M}{\partial p} = \sum_{i=1}^{12} M_i \frac{\partial x_i}{\partial p}$$

$$\frac{\partial M}{\partial \phi} = \sum_{i=1}^{12} M_i \frac{\partial x_i}{\partial \phi}$$

$$\frac{\partial R}{\partial T} = -\frac{R}{M} \frac{\partial M}{\partial T}$$

$$\frac{\partial R}{\partial p} = -\frac{R}{M} \frac{\partial M}{\partial p}$$

$$\frac{\partial R}{\partial \phi} = -\frac{R}{M} \frac{\partial M}{\partial \phi}$$

$$\frac{\partial h}{\partial T} = -\frac{h}{M} \frac{\partial M}{\partial T} + \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{12} \left(x_i \bar{C}_{p,i}(T) + \bar{h}_i(T) \right) \frac{\partial x_i}{\partial T}$$

$$\frac{\partial h}{\partial p} = -\frac{h}{M} \frac{\partial M}{\partial p} + \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{12} \bar{h}_i(T) \frac{\partial x_i}{\partial p}$$

$$\frac{\partial h}{\partial \phi} = -\frac{h}{M} \frac{\partial M}{\partial \phi} + \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{12} \bar{h}_i(T) \frac{\partial x_i}{\partial \phi}$$

$$\frac{\partial s}{\partial T} = -\frac{s}{M} \frac{\partial M}{\partial T} + \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{12} \left(\bar{s}_i(T, x_i p) \frac{\partial x_i}{\partial T} + \frac{x_i}{T} \bar{C}_{p,i}(T) - \bar{R} \right) \frac{\partial x_i}{\partial T}$$

$$\frac{\partial s}{\partial p} = -\frac{s}{M} \frac{\partial M}{\partial p} + \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{12} \left(\bar{s}_i(T, x_i p) \frac{\partial x_i}{\partial p} - \bar{R} \frac{x_i}{p} - \bar{R} \frac{\partial x_i}{\partial p} \right)$$

$$\frac{\partial s}{\partial \phi} = -\frac{s}{M} \frac{\partial M}{\partial \phi} + \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{12} \left(\bar{s}_i(T, x_i p) \frac{\partial x_i}{\partial \phi} - \bar{R} \frac{\partial x_i}{\partial \phi} \right)$$

$$\frac{\partial u}{\partial T} = \frac{\partial h}{\partial T} - T \frac{\partial R}{\partial T} - R$$

$$\frac{\partial u}{\partial p} = \frac{\partial h}{\partial p} - T \frac{\partial R}{\partial p}$$

$$\frac{\partial u}{\partial \phi} = \frac{\partial h}{\partial \phi} - T \frac{\partial R}{\partial \phi}$$

2.6 Comentários Adicionais.

Nos modelos preditivos de uma zona de combustão (Capítulo 3) após a determinação da composição dos gases contidos no cilindro para uma dada posição inicial do pistão, é sempre possível conhecer a massa de combustível dentro do cilindro (m_f) para uma outra posição do pistão, antes mesmo de se calcular a composição correspondente à essa condição. Isto deve-se a que nesses modelos admite-se que se conhece *a priori* a taxa de queima de combustível que, por hipótese, coincide com a taxa de entrada de combustível na câmara de combustão. Além disso, o volume no cilindro (V) pode ser determinado a partir da geometria do mecanismo biela-manivela (Apêndice B), o que permite calcular o número de moles dos produtos de combustão (N_{prod}) pela equação de estado. Assim,

$$N_{prod} = \frac{pV}{RT}$$

A partir da massa de combustível e do número de moles na mistura de gases, a variável x_{13} é determinada pela seguinte expressão

$$x_{13} = \frac{m_f}{M_f N_{prod}}$$

onde M_f é o peso molecular aparente do combustível. Assim, para se determinar a composição da mistura de gases no caso do modelo preditivo, não mais é preciso resolver o sistema dado pelas Equações 2.22 e 2.23, bastando achar o valor de x_8 que satisfaz a uma delas. A outra equação é satisfeita automaticamente.

Capítulo 3

Processos nos Cilindros

3.1 Introdução.

Os processos que ocorrem nos cilindros dos motores de combustão interna influenciam diretamente as características operacionais primárias do motor tais como potência, eficiência e a quantidade de gases poluentes emitidos durante a exaustão. Isto determina a necessidade de se aprimorar os nossos conhecimentos sobre esses processos para o aperfeiçoamento destes equipamentos propulsores.

Os fenômenos envolvidos no ciclo de operação dos motores diesel são de extrema complexidade. Durante a admissão, a carga ingressa no cilindro através das válvulas, formando um escoamento tridimensional, turbulento e variável no tempo. A massa de ar admitida é comprimida pelo pistão a uma taxa de compressão que pode variar de motor para motor entre 14:1 e 22:1. Quando o pistão se aproxima do ponto morto superior inicia-se a injeção de combustível, o qual é introduzido no cilindro na fase líquida e se evapora ao entrar em contato com os gases quentes, formando assim uma mistura inflamável. Nas regiões onde as condições locais de temperatura, pressão e relação ar-combustível são propícias, formam-se focos de auto-ignição a partir dos quais se desenvolve o processo de combustão (geralmente antes mesmo do final da injeção de combustível). Dessa forma, a combustão ocorre em um meio altamente turbulento, confinado entre fronteiras móveis e onde as paredes influenciam diretamente o processo. Deve-se destacar ainda que o óleo diesel utilizado como combustível, é constituído por centenas de componentes orgânicos cujos mecanismos de combustão ainda não foram satisfatoriamente explicados.

Como já foi comentado no Capítulo 2, muitos aspectos relacionados com os fenômenos acima citados saem do domínio dos nossos conhecimentos. Isto tem criado a necessidade de recorrer ao auxílio de modelos matemáticos para assim tentar superar estas limitações. A utilização de modelos para analisar os processos internos aos cilindros dos motores, é contemporânea ao surgimento dos próprios motores no final do século passado. Heywood [32] atribui a Sir Dugal Clerk (1854–1932) o pioneirismo no uso dos ciclos padrão a ar para comparar eficiências de motores. Esse autor menciona que Rudolf Diesel (1858–

1913) propôs ciclos com formatos de fornecimento de calor a pressão constante e a temperatura constante para explicar o funcionamento do motor que estava desenvolvendo.

A partir da década dos anos 20 começaram a ser utilizados os ciclos ar-combustível, nos quais se leva em consideração o fato que o fluido de trabalho sofre transformações físicas e químicas devido à combustão e não por fornecimento de calor a partir de uma fonte externa como é admitido nos ciclos padrão a ar. Com a utilização dos ciclos ar-combustível tornou-se possível incluir nas simulações os efeitos da qualidade de mistura e da fração de gases residuais.

A atividade de modelagem matemática dos motores concentrou-se, durante um longo período, no aperfeiçoamento dos métodos de cálculo das propriedades termodinâmicas do fluido de trabalho, através do desenvolvimento das chamadas cartas de propriedades [7, 9]. Só com a popularização dos computadores digitais, os modelos termodinâmicos que incluem o tempo como uma variável explícita começaram a ser amplamente utilizados. Dentre este grupo de modelos pode-se identificar duas categorias — os modelos de uma zona de combustão [32], os quais entraram em cena na década de 60 e os modelos multizonais [33] que começaram a circular já nos anos 70.

Nos modelos de uma zona de combustão (chamados também de modelos zero-dimensionais) admite-se que a composição e a temperatura dos gases são uniformes em todo o volume do cilindro. Além disso, considera-se que o combustível injetado se mistura e reage instantaneamente com os gases (ideais) que se encontram na câmara de combustão [12]. Dessa forma, fenômenos tais como evaporação de gotículas de combustível, penetração de ar dentro do jato de combustível e reações pré-chama, não são levados em conta. Os efeitos da geometria da câmara de combustão e as variações espaciais de temperatura e composição também não são considerados nestes modelos.

Os modelos zero-dimensionais vêm sendo utilizados para analisar o desenvolvimento do processo de combustão através da determinação da taxa aparente de queima de combustível (ou taxa aparente de liberação de energia) [34, 35, 36, 37]. Para se efetuar este tipo de análise é preciso dispor de diagramas experimentais da pressão no cilindro. Alternativamente, os modelos zero-dimensionais têm sido usados para se prever a variação da pressão no cilindro e, a partir deste parâmetro — os índices de desempenho e eficiência do motor [11, 21]. Neste caso, a taxa de queima de combustível deve ser especificada *a priori* por meio de correlações empíricas ou semi-empíricas ajustadas a partir de dados experimentais.

Nos modelos multizonais [18, 19, 22, 38, 39], a taxa de queima de combustível é calculada a partir de quantidades físicas mais fundamentais, usando-se sub-modelos fenomenológicos de penetração do ar dentro do jato de combustível juntamente com sub-modelos de combustão da mistura combustível-ar. Os sub-modelos de penetração de ar no jato de combustível incluem correlações empíricas que permitem estimar a forma do jato. Este é dividido em parcelas (zonas) cuja localização espacial pode ser determinada em virtude da

correlação adotada. Estas correlações geralmente se baseiam em dados experimentais obtidos para jatos gasosos estacionários e podem levar em conta a deflexão decorrente do movimento relativo dos gases e os efeitos causados pela colisão com as paredes sólidas. Em cada zona, as propriedades do fluido de trabalho são consideradas espacialmente uniformes, mas variáveis em função do tempo. Além disso, a combustão é analisada como um processo de mistura entre o combustível nesse elemento de jato e o ar das vizinhanças. Os modelos multizonais representam uma tentativa de se levar em conta a influência da geometria da câmara de combustão sobre os índices de desempenho, eficiência e poluição. Estes modelos são particularmente apropriados para se determinar o conteúdo de poluentes nos gases emitidos pelo motor. Nesse caso, os modelos multizonais incluem apropriados sub-modelos de cinética de formação de poluentes.

A partir dos anos 80 vem se verificando um crescente interesse pela aplicação de modelos multidimensionais para estudar os processos internos aos cilindros do motor diesel [1, 40]. Nestes modelos, as equações de conservação da massa, da energia, da quantidade de movimento e das espécies químicas são resolvidas juntamente com sub-modelos de turbulência. Assim, as variações temporais e espaciais das propriedades termodinâmicas e hidrodinâmicas do fluido de trabalho são levadas em conta. Na atualidade este tipo de modelos tem sido aplicado com algum sucesso na simulação dos processos de intercâmbio de gases, compressão e na simulação do desenvolvimento do jato de combustível antes do início da combustão. As tentativas de utilizar modelos tri-dimensionais e transitórios para simular o processo de combustão tem evidenciado que ainda há muito o que fazer para se conseguir resultados satisfatórios [1]. Além disso, ainda nos casos em que se utilizam códigos em duas dimensões, os elevados custos computacionais associados a estes modelos impedem que eles possam ser usados para estudos paramétricos rotineiros.

Desde que este trabalho visa analisar os aspectos relacionados com o desempenho e a eficiência do motor mediante a realização de estudos paramétricos, considerou-se que pela sua simplicidade e requerimentos computacionais modestos, o modelo de uma zona de combustão é adequado para se atingir este objetivo. Em vista disto, os desenvolvimentos e as discussões subsequentes serão feitos desde a perspectiva do modelo de uma zona de combustão.

3.2 A Análise pela Primeira Lei da Termodinâmica.

A Primeira Lei da Termodinâmica estabelece que a variação da energia interna dos gases que se encontram dentro do volume de controle (dU) é igual ao calor transferido para o interior deste volume (dQ), descontado o trabalho produzido pela superfície de controle (dW) e acrescido do fluxo líquido de entalpia de estagnação que atravessa esta superfície ($\sum h_i dm_i$). Admitindo-se

que a entrada e saída de massa ocorre somente através do bico injetor e das válvulas de admissão e escape, como mostrado na Figura 3.1, a Primeira Lei da Termodinâmica pode ser expressa por meio da seguinte equação

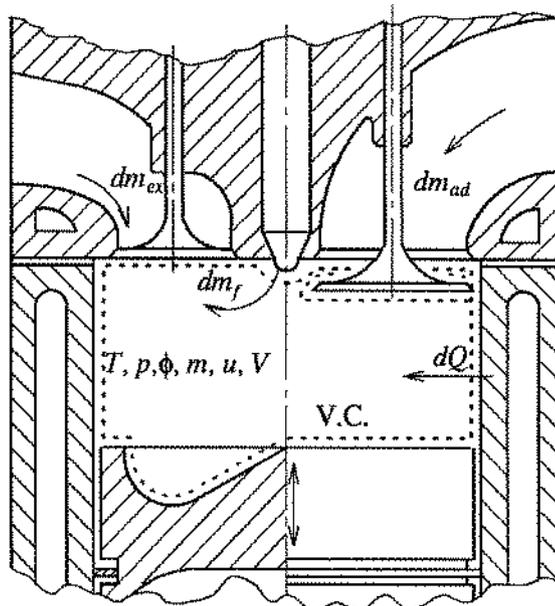


Figura 3.1: O volume de controle no cilindro do motor.

$$dU = dQ - dW + h_f dm_f + h_{ad} dm_{ad} + h_{ex} dm_{ex} \quad (3.1)$$

onde

$$dU = m du + u dm$$

$$dW = p dV$$

$$dm = dm_f + dm_{ad} + dm_{ex}$$

Substituindo estas expressões na Equação 3.1 e dividindo por $d\theta$, resulta

$$m \frac{du}{d\theta} + u \frac{dm}{d\theta} = \frac{dQ}{d\theta} - p \frac{dV}{d\theta} + h_f \frac{dm_f}{d\theta} + h_{ad} \frac{dm_{ad}}{d\theta} + h_{ex} \frac{dm_{ex}}{d\theta} \quad (3.2)$$

3.2.1 O Modelo Preditivo.

A partir da expressão acima para a Primeira Lei da Termodinâmica e da equação de estado dos gases ideais $pV = mRT$ é possível encontrar uma relação explícita para a taxa de variação da temperatura dos gases no cilindro. Para isto é necessário levar em conta que as propriedades do fluido de trabalho ficam determinadas especificando-se a temperatura, a pressão e a composição combustível-ar. Assim, pode-se escrever

$$u = u(T, p, \phi)$$

$$R = R(T, p, \phi)$$

Derivando estas expressões em relação a θ , obtém-se

$$\frac{du}{d\theta} = \frac{\partial u}{\partial T} \frac{dT}{d\theta} + \frac{\partial u}{\partial p} \frac{dp}{d\theta} + \frac{\partial u}{\partial \phi} \frac{d\phi}{d\theta} \quad (3.3)$$

$$\frac{dR}{d\theta} = \frac{\partial R}{\partial T} \frac{dT}{d\theta} + \frac{\partial R}{\partial p} \frac{dp}{d\theta} + \frac{\partial R}{\partial \phi} \frac{d\phi}{d\theta} \quad (3.4)$$

Derivando agora a equação de estado e explicitando $dp/d\theta$, resulta

$$\frac{dp}{d\theta} = p \left(\frac{1}{T} \frac{dT}{d\theta} + \frac{1}{R} \frac{dR}{d\theta} + \frac{1}{m} \frac{dm}{d\theta} - \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} \right) \quad (3.5)$$

Combinando esta expressão com 3.4 pode-se eliminar $dR/d\theta$. Dessa forma, obtém-se

$$\frac{dp}{d\theta} = p \left(\left[\frac{1}{T} + \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial T} \right] \frac{dT}{d\theta} + \frac{1}{m} \frac{dm}{d\theta} - \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} + \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial \phi} \frac{d\phi}{d\theta} \right) \left(1 - \frac{p}{R} \frac{\partial R}{\partial p} \right)^{-1} \quad (3.6)$$

A Equação 3.3 pode ser usada para substituir a derivada $dp/d\theta$ que aparece na equação acima. Assim, resulta

$$\begin{aligned} \frac{du}{d\theta} = & \frac{\partial u}{\partial T} \frac{dT}{d\theta} + \frac{\partial u}{\partial \phi} \frac{d\phi}{d\theta} + \frac{p \frac{\partial u}{\partial p}}{1 - \frac{p}{R} \frac{\partial R}{\partial p}} \times \\ & \left(\frac{1}{T} \frac{dT}{d\theta} + \frac{1}{m} \frac{dm}{d\theta} - \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} + \frac{1}{R} \left[\frac{\partial R}{\partial T} \frac{dT}{d\theta} + \frac{\partial R}{\partial \phi} \frac{d\phi}{d\theta} \right] \right) \end{aligned}$$

Com ajuda desta expressão é possível excluir a derivada $du/d\theta$ da Equação 3.2. Dessa forma pode-se chegar à seguinte relação para a variação da temperatura dos gases no cilindro

$$\frac{dT}{d\theta} = \frac{\frac{dV}{d\theta} \left(\frac{A}{V} - \frac{p}{m} \right) - \frac{d\phi}{d\theta} \left(\frac{\partial u}{\partial \phi} + \frac{A}{R} \frac{\partial R}{\partial \phi} \right) + \frac{1}{m} \left[\frac{dQ}{d\theta} + \sum (h_i - u - A) \frac{dm_i}{d\theta} \right]}{\frac{A}{R} \frac{\partial R}{\partial T}} \quad (3.7)$$

onde

$$\begin{aligned} A &= \frac{p \frac{\partial u}{\partial p}}{1 - \frac{p}{R} \frac{\partial R}{\partial p}} \\ i &= f, ad, ex \end{aligned}$$

As Equações 3.7 e 3.6 permitem calcular a temperatura e a pressão no cilindro do motor, respectivamente. Desde que a derivada da temperatura é um dos parâmetros requeridos para se determinar a derivada da pressão em relação ao ângulo de manivela ($dT/d\theta$ aparece na Equação 3.6 do lado direito), estas equações devem ser resolvidas sequencialmente: primeiro a Equação 3.7 e só depois a Equação 3.6. Para a solução destas equações, é necessário que tanto a taxa de transferência de calor $dQ/d\theta$ como a taxa de variação da massa no cilindro $dm/d\theta$ sejam conhecidas antecipadamente.

Para se determinar a taxa de transferência de calor, utiliza-se as correlações empíricas disponíveis na literatura. Algumas destas correlações são descritas em maior detalhe na Seção 3.3.

A taxa de variação da massa dentro do cilindro ($dm/d\theta$) é tratada de forma diferente nas fases aberta e fechada do ciclo. Durante o período de intercâmbio de gases, a massa no cilindro varia em função dos escoamentos de admissão e escape ($dm_{ad}/d\theta$ e $dm_{ex}/d\theta$ respectivamente). Assim, $dm/d\theta$ pode ser calculada a partir do modelamento desses escoamentos. Já durante o intervalo quando as válvulas se encontram fechadas, a massa no cilindro varia apenas em decorrência da injeção de combustível ($dm_f/d\theta$), uma vez que é admitido que não ocorrem vazamentos entre o cilindro e os anéis. Entretanto, algumas considerações devem ser feitas para definir $dm_f/d\theta$. Em primeiro lugar deve ser lembrado que no modelo de uma zona de combustão (o qual é adotado neste trabalho) se admite que o combustível se mistura e queima instantaneamente logo após ser introduzido na câmara de combustão. Em segundo lugar, deve ser reconhecido que em um motor real, a velocidade de injeção de combustível é, na verdade, diferente da velocidade de queima do combustível. Por último, é preciso levar em conta que o objetivo da modelagem é descrever os estados termodinâmicos que o fluido de trabalho atravessa, os quais, durante a combustão, são determinados principalmente pela velocidade com que a energia química contida no combustível é liberada, e não pela velocidade com que o combustível ingressa na câmara. Estas considerações levam a concluir que o parâmetro $dm_f/d\theta$ deve corresponder à taxa de queima de combustível (ou taxa de liberação de energia) e não à taxa de injeção de combustível. Esta taxa de liberação de energia durante a combustão pode ser estimada a partir de correlações empíricas disponíveis na literatura (Seção 3.4).

Uma vez que no modelo de uma zona de combustão se admite que o fluido de trabalho é constituído por produtos de combustão, é necessário considerar que a taxa de equivalência combustível-ar ϕ que aparece nas equações acima se refere a uma mistura combustível-ar capaz de produzir, sob as condições de pressão e temperatura em que se encontram os gases no cilindro, a mesma massa e a mesma composição de gases de combustão. Esta mistura *equivalente* é formada por uma massa m_a de ar e uma massa m_c de combustível. Durante a solução das Equações 3.6 e 3.7, a derivada $d\phi/d\theta$ deve ser expressa em função dos fluxos de massa através das válvulas ($dm_{ad}/d\theta$ e $dm_{ex}/d\theta$), bem como em função da taxa de queima do combustível ($dm_f/d\theta$). Para isto é preciso levar em conta que a relação de equivalência combustível-ar é definida pela seguinte expressão

$$\phi = \frac{1}{FA_s} \frac{m_c}{m_a} \quad (3.8)$$

onde

- FA_s - relação massica estequiométrica combustível-ar;
- m_c - massa de combustível na mistura equivalente;
- m_a - massa de ar na mistura equivalente.

Derivando a equação acima em relação a θ , resulta

$$\frac{d\phi}{d\theta} = \phi \left(\frac{1}{m_c} \frac{dm_c}{d\theta} - \frac{1}{m_a} \frac{dm_a}{d\theta} \right) \quad (3.9)$$

Uma vez que os fluxos de massa através das válvulas de admissão e escape podem ocorrer no sentido do cilindro aos coletores e viceversa, as massas de ar e de combustível m_a e m_c podem variar em função desses fluxos. É evidente que a massa m_c depende também da quantidade de óleo diesel que é introduzida através do bico injetor (m_f). Assim, pode-se escrever

$$\begin{aligned} dm_a &= dm_{a,ad} + dm_{a,ex} \\ dm_c &= dm_{c,ad} + dm_{c,ex} + dm_f \end{aligned}$$

onde $dm_{a,ad}$ e $dm_{c,ad}$ representam, respectivamente, a variação da massa de ar e de combustível, causada pelo fluxo de massa através da válvula de admissão. Analogamente se definem $dm_{a,ex}$ e $dm_{c,ex}$.

No início do processo de admissão, durante o período de superposição de válvulas, pode acontecer que uma parte dos gases queimados saiam do cilindro através da válvula de admissão. Estes gases ingressam no coletor de admissão e se misturam com o ar que ali se encontra. Posteriormente, quando a pressão no cilindro diminui abaixo da pressão no coletor de admissão, essa mistura de ar e gases queimados é aspirada de volta ao cilindro. A rigor, este fato deveria ser levado em conta ao se determinar a relação ar-combustível do fluido de trabalho. No entanto, considerando-se que a quantidade de gases queimados que saem pela válvula de admissão é geralmente muito pequena, será admitido que a massa gasosa que entra no cilindro através da válvula de admissão é sempre constituída somente por ar. Assim, pode-se escrever

$$\begin{aligned} dm_{a,ad} &= dm_{ad} & dm_{ad} > 0 \\ dm_{c,ad} &= 0 & dm_{ad} > 0 \end{aligned}$$

Para o caso de entrada de gases no cilindro através da válvula de escape e também para o caso de saída de gases tanto pela válvula de admissão como de escape, considera-se que a relação de equivalência do fluxo que atravessa a superfície de controle é igual à relação de equivalência dos gases no cilindro. Nesse caso resulta

$$\begin{aligned} dm_{a,ad} &= dm_{ad} \frac{1}{1 + \phi FA_s} & dm_{ad} < 0 \\ dm_{c,ad} &= dm_{ad} \frac{\phi FA_s}{1 + \phi FA_s} & dm_{ad} < 0 \\ dm_{a,ex} &= dm_{ex} \frac{1}{1 + \phi FA_s} \\ dm_{c,ex} &= dm_{ex} \frac{\phi FA_s}{1 + \phi FA_s} \end{aligned}$$

3.2.2 O Modelo de Diagnose.

O modelo de uma zona de combustão pode ser aplicado na análise da evolução do processo de combustão de um motor real. Para isto, a taxa de queima de combustível deve ser calculada a partir do diagrama de pressão obtido experimentalmente. O cálculo se limita à parte do ciclo quando as válvulas estão fechadas, por isso pode-se escrever

$$\begin{aligned} dm_{ad} &= 0 \\ dm_{ex} &= 0 \\ dm_a &= 0 \\ dm_c &= dm_f \\ dm &= dm_f \end{aligned}$$

Levando-se em conta estas expressões e a definição da relação de equivalência ϕ (Equação 3.8), a Equação 3.9 resulta

$$\frac{d\phi}{d\theta} = \frac{1}{m_a FA_s} \frac{dm}{d\theta}$$

Considerando-se esta relação, a Equação 3.6 pode ser escrita na seguinte forma

$$\frac{dT}{d\theta} = \left[\left(\frac{1}{p} - \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial p} \right) \frac{dp}{d\theta} - \frac{1}{m} \frac{dm}{d\theta} \left(1 + \frac{Bm}{R} \frac{\partial R}{\partial \phi} \right) + \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} \right] \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial T} \right)^{-1} \quad (3.10)$$

onde

$$B = \frac{1}{m_a FA_s} = cte$$

De outro lado, a partir da Equação 3.3 pode-se eliminar a derivada $du/d\theta$ de 3.2. Assim, resulta

$$m \frac{\partial u}{\partial T} \frac{dT}{d\theta} + m \frac{\partial u}{\partial p} \frac{dp}{d\theta} + \left(Bm \frac{\partial u}{\partial \phi} + u - h_f \right) \frac{dm}{d\theta} = \frac{dQ}{d\theta} - p \frac{dV}{d\theta} \quad (3.11)$$

Usando a Equação 3.10 para substituir a derivada $dT/d\theta$ na expressão acima e explicitando $dm/d\theta$, obtém-se

$$\frac{dm}{d\theta} = \frac{\frac{dQ}{d\theta} - \left(p + \frac{Cm}{V} \right) \frac{dV}{d\theta} - \left(\frac{Cm}{p} - \frac{Cm}{R} \frac{\partial R}{\partial p} + m \frac{\partial u}{\partial p} \right) \frac{dp}{d\theta}}{Bm \frac{\partial u}{\partial \phi} + u - h_f - C - \frac{CmB}{R} \frac{\partial R}{\partial \phi}} \quad (3.12)$$

onde

$$C = \frac{\frac{\partial u}{\partial T}}{\frac{1}{T} + \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial T}}$$

A Equação 3.12 permite determinar a velocidade com que se produz a queima de combustível quando tanto a pressão no cilindro (e a sua derivada) como a taxa de transferência de calor são especificadas.

3.3 A Transferência de Calor às Paredes do Cilindro.

As variações de temperatura e pressão que o fluido de trabalho sofre, assim como o escoamento tridimensional, transitório e turbulento a que ele está sujeito, determinam que a transferência de calor às superfícies do cilindro, do pistão e do cabeçote seja um fenômeno extremamente complexo, de natureza não estacionária e com características tridimensionais. Borman e Nishiwaki [41] destacam que o fluxo de calor em um mesmo ponto pode variar de 0 a 10 MW/m² e voltar a 0 em menos de 10 milissegundos, e que a diferença dos fluxos de calor em pontos afastados apenas em 1 cm pode chegar a 5 MW/m².

Qualquer abordagem detalhada do problema resulta extremamente difícil dada a incessante variação das propriedades termo-físicas do fluido e a presença de fronteiras móveis e de complicadas geometrias tanto do lado dos gases como do lado do sistema de arrefecimento.

Durante o processo de admissão, a transferência de calor ocorre principalmente devido à convecção e, normalmente, no sentido das paredes ao gás. Dada a pequena diferença de temperaturas que origina esta transferência, o calor recebido pelo fluido de trabalho durante este processo, normalmente não excede 1–2% do total transmitido por ciclo ao sistema de arrefecimento [42]. Já durante o processo de compressão, a direção do fluxo (global) de calor se inverte, de modo que no final deste processo o calor é transmitido do gás às paredes. O calor líquido repassado às paredes durante a compressão é aproximadamente de 5 a 8% do calor total transferido por ciclo ao sistema de arrefecimento.

Quando a combustão se inicia, o aumento da temperatura, da turbulência e da densidade do fluido de trabalho determina que o fluxo de calor convectivo seja intensificado. Além disso, a alta temperatura dos gases e o surgimento de uma intensa chama luminosa torna significativa a transferência de calor por radiação. Duas fontes de radiação se destacam — os gases multiatômicos (principalmente H_2O e CO_2), e o material particulado incandescente que conforma a chama luminosa. Os gases são capazes de emitir e absorver energia radiante somente em determinadas faixas de comprimentos de onda, por isso a eles se deve apenas 2–3% do total do calor transmitido por radiação durante o ciclo todo [43]. A principal fonte de radiação é constituída pelas partículas sólidas que se formam como produtos intermédios durante a combustão. Aquecidas até temperaturas que variam entre 2500 e 3000 K, estas partículas emitem em todo o espectro de comprimentos de onda. Orlin *et alii* [44] comentam que a magnitude do fluxo de calor devido à radiação chega a ser da ordem de 50 a 60% do valor do fluxo por convecção. Petrichenko [43] anota que no caso de operação em regimes transitórios e no caso de partida a frio, o fluxo de calor devido à radiação pode ser maior que a componente convectiva. Apesar que a superfície de transferência de calor é relativamente pequena durante a combustão visível (o pistão se encontra nas proximidades do ponto morto superior), a quantidade de calor transmitido às paredes durante este pe-

riodo corresponde aproximadamente a 25–35% do total repassado ao sistema de arrefecimento em cada ciclo.

Durante a expansão, a pressão e a temperatura dos gases diminuem rapidamente e, conseqüentemente, os fluxos de calor por convecção e radiação também diminuem. Este último praticamente se extingue com a luminosidade da chama. Apesar disso, como a transferência de calor ocorre com aumento da superfície da interfase, ainda se transfere uma significativa quantidade de calor do fluido às paredes (em torno de 25% do total transferido por ciclo ao sistema de arrefecimento).

Durante o processo de exaustão, a transferência de calor deve-se principalmente à convecção. No início deste processo, durante o período de exaustão espontânea, duas tendências opostas podem ser observadas — de um lado a rápida diminuição da pressão, da temperatura e da densidade dos gases tendem a diminuir a taxa de transferência de calor. De outro lado, a abertura da válvula de escape provoca um aumento da turbulência do fluido, o que acaba intensificando a transferência de calor no início deste período. Este efeito desaparece à medida que os gases queimados vão deixando o cilindro. Durante a exaustão forçada, a pressão e a temperatura no cilindro se mantêm praticamente constantes e então não ocorrem maiores alterações na densidade dos fluxos de calor durante esse período. Ao todo, durante o processo de exaustão, transfere-se de 5 a 15% do calor total transmitido ao sistema de arrefecimento do motor [42].

Como já foi mencionado acima, a complexidade do problema relacionado à transferência de calor, torna extremamente difícil qualquer tentativa de se estudar detalhadamente este fenômeno. Por isso, a saída usual adotada pelos modeladores consiste em utilizar correlações simples obtidas a partir de dados experimentais. Tais correlações empíricas permitem o cálculo do coeficiente de transferência de calor em função de propriedades do fluido e de parâmetros que caracterizam as dimensões do motor, a hidrodinâmica do escoamento no cilindro e as peculiaridades do processo de combustão. Para a determinação da taxa de transferência de calor, admite-se que a camada limite térmica é extremamente fina e possui capacidade térmica desprezível. Isto permite adotar a hipótese que o fluxo de calor na parede é proporcional à diferença de temperatura entre o o gás e o fluido.

A literatura é farta quanto ao número de correlações disponíveis para se calcular o coeficiente de transferência de calor. Dentre tais correlações, aquelas propostas por Annand e por Woschni são as mais frequentemente citadas.

Num excelente artigo publicado em 1963, Annand [45] revisou boa parte das correlações para o coeficiente pelicular existentes até então e mostrou que a maioria delas ou são dimensionalmente incorretas ou apresentam termos provenientes de deduções errôneas. Esse autor analisou estatisticamente um grande número de dados experimentais da temperatura das paredes que confinam o gás, e chegou à conclusão que a transferência de calor por convecção é representada adequadamente pela expressão

$$Nu = a(Re)^b \quad (3.13)$$

Annand propôs uma correlação para o fluxo de calor instantâneo que inclui separadamente os termos de convecção e radiação. A correlação é a seguinte

$$\frac{q}{A} = a \frac{\kappa}{D_c} (Re)^b (T_w - T) + c(T_w^4 - T^4) \quad (3.14)$$

onde

- q – taxa de transferência de calor;
- A – área de transferência de calor;
- κ – condutibilidade térmica do fluido;
- D_c – diâmetro do cilindro;
- T – temperatura do fluido;
- T_w – temperatura da parede;
- a, b, c – constantes de ajuste.

A dimensão característica no número de Reynolds que aparece na expressão acima, é o diâmetro do cilindro D_c , enquanto que a velocidade característica é a velocidade média do pistão $w_p = Sn/30$, onde S é o curso do pistão e n — a frequência de rotação do eixo do motor em r.p.m.. Assim, pode-se escrever

$$Re = \frac{\rho w_p D_c}{\mu}$$

Para se determinar a viscosidade dinâmica do fluido (μ), Annand sugeriu a seguinte expressão empírica

$$\mu = 4.57 \times 10^{-7} T^{0.645}$$

onde T está em [K] e μ em $[\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}]$. A condutividade térmica do fluido (κ), pode ser determinada admitindo-se $Pr = 0.7$. Assim, resulta

$$\kappa = \frac{C_p \mu}{0.7}$$

A correlação de Annand tem o inconveniente de não ser válida para os processos de admissão e escape. Por isso, quando a simulação envolve o ciclo todo, é necessário recorrer a outras expressões que permitam determinar o fluxo de calor durante esses processos.

Woschni [46] realizou uma série de experimentos tanto em bombas de volume constante como em motores diesel. Esse autor concluiu que os dados experimentais de temperatura local das paredes não são apropriados para se determinar o coeficiente pelicular médio no cilindro do motor, uma vez que esses dados são extremamente dispersos. Baseando-se em resultados de balanços térmicos, Woschni obteve uma correlação para o coeficiente de transferência de calor (h [$\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$]), a qual obedece a Equação 3.13

$$h = 820 D_c^{-0.2} p^{0.8} W^{0.8} T^{-0.53} \quad (3.15)$$

onde

- p – pressão, [MPa];
- W – velocidade característica, [m/s];
- D_c – diâmetro do cilindro, [m];
- T – temperatura do fluido, [K];

A correlação proposta por Woschni utiliza expressões diferentes para a velocidade característica do fluido (W) durante os períodos de intercâmbio de gases, compressão e combustão–expansão. Dessa forma leva-se em conta o efeito dos níveis diferentes de turbulência que caracterizam cada etapa do ciclo

$$W = c_1 w_p + c_2 \frac{V_h T_1}{p_1 V_1} (p - p_0) \quad (3.16)$$

onde

- w_p – velocidade média do pistão, [m/s];
- V_h – volume deslocado pelo pistão;
- p – pressão dos gases no cilindro;
- p_0 – pressão dos gases no caso de acionamento externo do motor;
- T_1, p_1, V_1 – temperatura, pressão e volume no cilindro, relativos a um ponto do ciclo quando as válvulas estão fechadas;
- c_1 – constante de ajuste. No caso do motor ensaiado por Woschni, os valores encontrados foram: 6.18 para os processos de admissão e escape, e 2.28 para os processos de compressão e expansão;
- c_2 – constante de ajuste. No caso do motor ensaiado por Woschni o valor encontrado foi 3.24×10^{-3} [m/s].

Na fórmula de Woschni, os efeitos da radiação não são considerados separadamente mas estão embutidos no termo onde aparece a diferença de pressões ($p - p_0$).

Deve ser notado que a expressão proposta por Woschni não estabelece diferença entre os coeficientes de película para os processos de admissão e escape. Nishiwaki *et alii* [47] exploraram este fato e propuseram as seguintes correlações para os períodos de admissão e escape respectivamente

$$Nu = 0.168 (Re)^{0.867}$$

$$Nu = 1.690 (Re)^{0.578}$$

onde o número de Reynolds é baseado na velocidade média do pistão e no diâmetro do cilindro.

Na literatura são encontradas correlações que permitem calcular o valor local do coeficiente de película. Nessas correlações, o número de Reynolds é definido em função da velocidade local do fluido. Ao respeito deste tipo de formulações deve ser dito que a determinação da velocidade local do fluido é um problema complexo cuja solução geralmente envolve fortes hipóteses simplificadoras. Isto determina que os erros cometidos em tais abordagens sejam da mesma ordem de grandeza que os erros inerentes às formulações mais simples aqui descritas. Entre os trabalhos deste tipo podem ser citados aqueles de Morel *et alii* [48] e de Rao e Bardou [49].

Uma vez que as dimensões e os regimes de funcionamento dos motores podem variar em uma larga faixa de valores e dada a grande variedade de formatos de câmara de combustão e métodos de organização dos processos

internos ao cilindro, as fórmulas propostas para o cálculo do coeficiente de transferência de calor devem necessariamente ser ajustadas caso a caso para se conseguir reproduzir as condições em cada motor. Este ajuste deve basear-se, é claro, em dados obtidos experimentalmente.

A determinação do coeficiente de película não só permite modelar o ciclo termodinâmico do motor mas também possibilita a determinação dos campos de temperatura dos componentes que se encontram em contato direto com os gases do cilindro. Estes cálculos são particularmente úteis no caso dos motores onde a pressão média indicada é elevada (acima de 2MPa), uma vez que nessas condições a alta densidade dos fluxos de calor pode ocasionar excessivo aquecimento local nas regiões mais exigidas pela carga térmica, como é o caso da válvula de escape e da região do cabeçote entre o bico injetor e a válvula de escape [50].

3.4 A Taxa Aparente de Liberação de Energia.

A injeção de combustível no motor diesel se inicia quando o pistão se aproxima do ponto morto superior. O combustível ingressa na câmara de combustão na fase líquida e se evapora rapidamente ao entrar em contato com os gases quentes que ali se encontram. No final da compressão, quando a temperatura na câmara de combustão excede a temperatura de auto-inflamação da mistura combustível-ar, surgem focos de ignição a partir dos quais se propagam frentes de chama que varrem o volume onde a mistura preparada desde o início da injeção se encontra dentro dos limites de inflamabilidade. Este é o estágio correspondente à combustão pré-misturada mostrado na Figura 3.2. A velocidade de liberação de energia neste período é controlada pela cinética das reações em cadeia que caracterizam a combustão de misturas homogêneas. Estas reações são extremamente rápidas o que determina que este primeiro estágio apresente as características de uma explosão. À medida que a mistura já preparada é consumida, as ramificações das reações em cadeia vão se extingindo e então a taxa de liberação de energia diminui rapidamente. A partir de determinado momento, a combustão ocorre na medida que os vapores de combustível se misturam com o ar e esta mistura entra nas zonas onde ocorre queima. Assim, a taxa de liberação de energia não mais é determinada pela velocidade das reações químicas, e sim pela velocidade de evaporação do combustível e pela difusão dos vapores de combustível no ar — é o estágio difusivo da combustão (Figura 3.2).

A aplicação do modelo zero-dimensional para a simulação da combustão nos motores diesel, requer que a taxa de liberação de energia seja especificada. Em geral, pode-se dizer que a precisão com que o modelo simula o processo de combustão depende em grande parte, de quanto este parâmetro corresponde às condições verificadas no motor real. Dada a importância deste parâmetro, numerosos trabalhos de caráter experimental e computacional vêm sendo realiza-

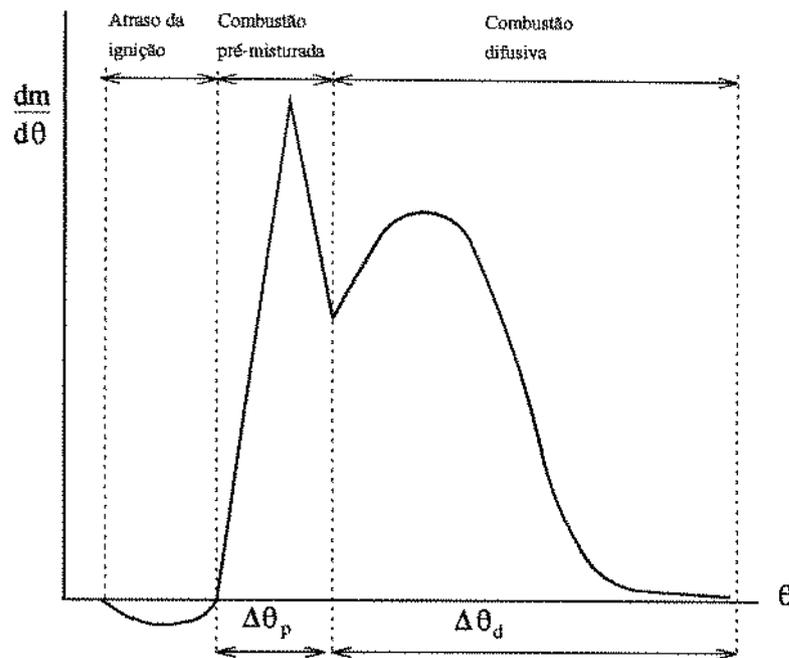


Figura 3.2: A taxa de queima de combustível típica nos motores diesel.

dos, visando uma melhor compreensão dos mecanismos de liberação de energia durante a combustão e a determinação da influência que este parâmetro exerce sobre os índices de eficiência e desempenho do motor.

Lyn [51] utilizou gráficos triangulares e retangulares para representar a taxa de liberação de energia e verificou que estes formatos afetam a taxa de elevação da pressão e a pressão máxima do ciclo, a qual por sua vez influencia marcadamente a eficiência do motor. Esse autor também estudou os efeitos da duração da combustão e da taxa de compressão sobre os índices de eficiência e desempenho, e determinou valores ótimos tanto para a pressão máxima do ciclo como para a taxa de compressão.

Austen e Lyn [52] obtiveram experimentalmente a curva de injeção de combustível e calcularam a taxa de liberação de energia a partir de diagramas experimentais da pressão no cilindro. Esses autores propuseram um modelo empírico para relacionar a taxa de liberação de energia e a taxa de injeção. O objetivo desse trabalho era fazer o caminho inverso e determinar a curva de injeção capaz de produzir o formato desejado de liberação de energia. A partir da análise das curvas de liberação de energia, calculadas com base nos diagramas experimentais de pressão, Austen e Lyn identificaram os estágios de combustão pré-misturada e difusiva que ocorrem no motor diesel.

Valendo-se de um extenso estudo fotográfico do processo de combustão em motores diesel de injeção direta e de pré-câmara, Alcock e Scott [53] mostraram que a maior parte da combustão ocorre com intensa luminosidade, como é característico das chamas difusivas. Além disso, os registros obtidos mostraram que na maioria das condições de operação que foram monitoradas, o jato de combustível atinge as paredes sólidas e se desloca ao longo delas. Esses au-

tores notaram que o fenômeno da detonação não está associado à massa total de combustível que se encontra na câmara no momento da ignição, mas sim à porção já misturada com o ar.

Lyn e Valdmanis [54] realizaram um exaustivo estudo experimental a fim de determinar a influência de diversos parâmetros construtivos e operacionais, sobre a duração do atraso da ignição. Eles encontraram que a temperatura e a pressão na câmara de combustão são os fatores que mais afetam este atraso em condições normais de operação do motor, e que os parâmetros que determinam o formato do jato de combustível e a sua mistura com o ar, exercem influência secundária.

Baseando-se na teoria das reações em cadeia proposta por Semenov [55], a qual explica a combustão de misturas homogêneas, Wiebe [56] deduziu uma expressão semi-empírica para a taxa de liberação de energia e sugeriu que ela fosse aplicada em motores com formação de mistura externa e interna. Na dedução dessa expressão, Wiebe levou em conta que a taxa de combustão é proporcional à velocidade de formação de radicais ativos e admitiu que a taxa de geração destes radicais por unidade de massa de combustível é proporcional à duração da combustão elevada a um expoente a ser determinado. A fórmula de Wiebe expressa formalmente a cinética de combustão em misturas homogêneas combustível-ar, por isso ela é adequada para simular a combustão em motores com formação externa de mistura. No entanto, esta correlação é incapaz de descrever a combustão em dois estágios que ocorre no motor diesel. A função proposta por Wiebe tem a seguinte forma

$$\chi = 1 - \exp \left\{ -6.908 \left(\frac{\theta - \theta_{ig}}{\theta_z - \theta_{ig}} \right)^{\zeta+1} \right\}$$

onde

- χ - fração de combustível queimada até o instante corrente;
- θ_{ig} - ângulo de manivela correspondente ao início da ignição;
- θ_z - ângulo de manivela correspondente ao instante quando 99.9% da massa total de combustível é queimada;
- ζ - parâmetro de forma da função de Wiebe.

Shipinski *et alii* [34] e Woschni e Anisits [35] aplicaram a função de Wiebe no estudo da combustão em motores diesel e propuseram correlações empíricas para avaliar os parâmetros desta expressão a partir de variáveis operacionais e geométricas do motor.

Percebendo que com apenas uma função de Wiebe não é possível representar os dois máximos que a taxa de liberação de energia exibe na maioria das situações, Watson *et alii* [57] e posteriormente Miyamoto *et alii* [36], usaram duas tais funções e conseguiram reproduzir com bastante precisão as curvas de liberação de energia que calcularam a partir de diagramas experimentais da pressão no cilindro. Em ambos esses trabalhos, os parâmetros da fórmula de Wiebe foram expressos em função de variáveis operacionais e construtivas do motor.

Em vista que a função dupla de Wiebe permite representar razoavelmente bem a taxa de liberação de energia durante a combustão, neste trabalho foi adotada essa correlação. Entretanto, deve ser mencionado que se no caso da combustão de misturas homogêneas, a função de Wiebe pode ser tratada como uma correlação semi-empírica, já no caso de motores com formação interna de mistura onde a combustão é essencialmente difusiva, esta expressão perde aquele qualificativo e se torna uma correlação meramente empírica, uma vez que os mecanismos da combustão difusiva não foram levados em conta na dedução desta expressão. A função dupla de Wiebe, na sua forma diferencial, pode ser escrita assim

$$\frac{d\chi}{d\theta} = \chi_p \frac{d\Psi_p}{d\theta} + (1 - \chi_p) \frac{d\Psi_d}{d\theta}$$

$$\frac{d\Psi_p}{d\theta} = 6.908 \frac{\zeta_p + 1}{\Delta\theta_p} \left(\frac{\theta - \theta_{ig}}{\Delta\theta_p} \right)^{\zeta_p} \exp \left\{ -6.908 \left(\frac{\theta - \theta_{ig}}{\Delta\theta_p} \right)^{\zeta_p + 1} \right\}$$

$$\frac{d\Psi_d}{d\theta} = 6.908 \frac{\zeta_d + 1}{\Delta\theta_d} \left(\frac{\theta - \theta_{ig}}{\Delta\theta_d} \right)^{\zeta_d} \exp \left\{ -6.908 \left(\frac{\theta - \theta_{ig}}{\Delta\theta_d} \right)^{\zeta_d + 1} \right\}$$

onde

- χ_p - fração total de combustível que queima na fase pré-misturada da combustão;
- $\Delta\theta_p$ - duração da fase pré-misturada da combustão;
- $\Delta\theta_d$ - duração da fase difusiva da combustão;
- ζ_p - parâmetro de forma da fase pré-misturada da combustão;
- ζ_d - parâmetro de forma da fase difusiva da combustão.

Miyamoto *et alii* [36] analisaram mais de cem mil diagramas experimentais da pressão no cilindro, obtidos em motores de dois tipos — um de injeção direta e outro de injeção indireta. Esses autores encontraram que para esses motores, os parâmetros $\Delta\theta_p$, ζ_p e ζ_d permaneceram constantes quando foram alteradas as condições de operação dos motores, enquanto que χ_p e $\Delta\theta_d$ resultaram ser funções lineares da quantidade de combustível injetada até o início da combustão.

3.5 A Análise Exergética no Cilindro do Motor.

3.5.1 Introdução.

Tradicionalmente o estudo dos processos e dos sistemas termodinâmicos tem sido feito baseando-se quase que exclusivamente na análise pela Primeira Lei

da Termodinâmica, o que tem permitido determinar a forma como a energia do sistema se distribui, seja para a produção de trabalho, para o aumento da energia interna do sistema ou se transfere na forma de calor ou juntamente com os fluxos de massa que atravessam a superfície de controle. Entretanto, os estudos de otimização de sistemas e processos termodinâmicos exigem um conhecimento mais profundo dos fenômenos envolvidos, o que implica na necessidade de se dispor de ferramentas adequadas que permitam obter maiores informações sobre esses fenômenos. O método exerético de análise termodinâmica torna-se um instrumento poderoso para este fim pois ele possibilita a avaliação da degradação da energia que causa a diminuição do trabalho útil que o sistema é capaz de realizar, e permite identificar de forma mais criteriosa as fontes de perda de energia disponível.

O imenso potencial do método exerético, para se realizar estudos de otimização de sistemas e processos, tem sido responsável pelo crescente interesse da comunidade científica em dominar e aplicar para um maior número de casos esta ferramenta. Este interesse tem se traduzido no incessante aumento da literatura técnica ao respeito. Como exemplo podem ser citados os trabalhos de Kestin [58], Sussman [59], Szargut [60], McGovern [61] e van Gool [62] tratando sobre questões conceituais da exergia. O conceito de eficiência exerética também tem sido amplamente explorado. Sobre este conceito tratam os trabalhos [63, 64, 65, 66, 67]. Uma ampla discussão sobre os estados de referência pode ser encontrada no trabalho de Gallo e Milanez [68].

No que se refere aos motores de combustão interna, os trabalhos de Primus e co-autores [69, 70, 71, 72, 73] representam uma notável contribuição à introdução dos conceitos associados à análise exerética para estudos de motores. Esses autores, avaliaram desde a perspectiva da análise exerética, os efeitos da turboalimentação, resfriamento da carga na admissão e isolamento térmico do cilindro (motor adiabático) sobre os parâmetros que caracterizam o desempenho dos motores diesel. Os trabalhos de Van Gerpen e Shapiro [74, 75] e Lipkea e DeJooode [76], incluíram uma análise mais rigorosa do processo de combustão, que leva em conta o conceito de disponibilidade química. Zellat [77] e Kumar *et alii* utilizaram formas simplificadas da análise exerética para o estudo dos processos nos motores diesel. O trabalho de Alkidas [78] apresenta resultados de um balanço de exergia global, similar aos balanços térmicos habitualmente realizados em motores. Os trabalhos de Lior e Rudy [79] e Gallo e Milanez [80] são exemplos da aplicação da análise exerética no estudo dos motores de ignição por centelha.

3.5.2 O Conceito de Exergia.

A exergia ou *disponibilidade* é o trabalho útil máximo que pode ser extraído do conjunto *sistema-meio ambiente*, quando são permitidas interações entre eles até que se atinja o equilíbrio termodinâmico (entenda-se equilíbrio mecânico, térmico e químico). Quando o equilíbrio é alcançado, se diz que o sistema se

encontra no *estado inativo irrestrito*. Ao contrário da energia, a exergia de um sistema pode ser destruída se esse sistema sofre processos *irreversíveis*. Além disso, as exergias de dois sistemas com o mesmo estado energético, podem ser muito diferentes, o que indica que a energia de um desses sistemas pode ser melhor aproveitada na produção de trabalho. Assim, pode-se dizer que a exergia é uma medida da qualidade da energia.

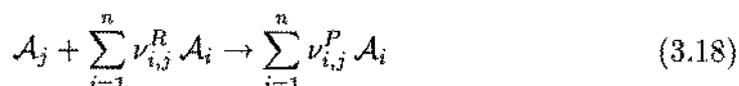
A exergia de um sistema pode ser determinada pela seguinte equação, obtida a partir da aplicação conjunta da Primeira e Segunda Leis da Termodinâmica para o volume de controle que envolve o sistema e o meio ambiente

$$Ex = U + p^\circ V - T^\circ S - \sum_{i=1}^n N_i \mu_i^\circ - \sum_{j=1}^m N_j \mu_j^\circ \quad (3.17)$$

onde

- Ex – exergia do sistema;
- N_i – número de moles das espécies químicas do sistema que também estão presentes no meio ambiente;
- N_j – número de moles das espécies químicas do sistema que não estão presentes no meio ambiente;
- p°, T° – pressão e temperatura no meio ambiente;
- μ_i°, μ_j° – potencial químico referente às condições no meio ambiente.

O potencial químico das espécies do sistema que não estão presentes no meio ambiente, pode ser calculado a partir das reações em que as substâncias ambientais interagem em quantidades estequiométricas para formar essas espécies. Estas reações podem ser expressas por equações do tipo



Onde \mathcal{A}_j é um componente do sistema que não se encontra no meio ambiente, e $\nu_{i,j}^R$ e $\nu_{i,j}^P$ são os coeficientes estequiométricos dos reagentes e dos produtos respectivamente. Assim, o potencial químico de \mathcal{A}_j , referente às condições ambientais, determina-se pela seguinte equação

$$\mu_j^\circ = \sum_{i=1}^n \nu_{i,j}^P \mu_i^\circ - \sum_{i=1}^n \nu_{i,j}^R \mu_i^\circ$$

3.5.3 A Exergia Química e Termomecânica.

A exergia de um sistema pode ser analisada como sendo constituída pela exergia química e a termomecânica. O critério que permite definir as parcelas da exergia que correspondem às exergias química e termomecânica, está estreitamente ligado ao conceito de *estado inativo restrito*. Em geral, define-se exergia termomecânica como o trabalho máximo que pode ser obtido do conjunto sistema-meio ambiente, trazendo o sistema ao estado inativo restrito. Já a exergia química é o trabalho máximo que pode ser obtido, deixando que o

sistema passe do estado inativo restrito ao estado inativo irrestrito. Para completar estas definições resta especificar qual é o estado inativo restrito. Este é definido como o estado de equilíbrio que o sistema atinge quando são permitidas interações de calor e trabalho (mas não de massa) entre o sistema e o meio ambiente. Conseqüentemente, a pressão e a temperatura ambientais caracterizam o estado inativo restrito. Entretanto, para uma completa definição deste estado é necessário especificar, além da temperatura e pressão, a composição química do sistema. Esta composição vem sendo definida de forma diversa por diferentes autores. Moran [81] utiliza o conceito de membranas semi-permeáveis para definir que a composição química que caracteriza o estado inativo restrito, é aquela que o sistema tinha no estado inicial. Já Van Gerpen e Shapiro [74] sustentam que o estado inativo restrito deve ser definido em função da composição de equilíbrio do sistema, uma vez que dessa forma se satisfaz a condição de zero potencial para produzir trabalho sem permitir troca de massa com o meio ambiente. Esta segunda definição parece ser mais consistente e por isso foi adotada neste trabalho. De acordo com a Equação 3.17, a exergia química pode ser determinada pela seguinte expressão

$$Ex_{ch} = U^* + p^0 V^* - T^0 S^* - \sum_{i=1}^{12} N_i^* \mu_i^0 \quad (3.19)$$

onde o superscrito “*” indica propriedades do sistema no estado inativo restrito. A exergia termomecânica pode ser determinada como a diferença entre a exergia total (ou termoquímica como também é chamada) e a exergia química. Assim

$$Ex_{tm} = Ex - Ex_{ch} \quad (3.20)$$

3.5.4 O Balanço de Exergia.

A equação de balanço de exergia pode ser desenvolvida a partir da Segunda Lei da Termodinâmica, escrita para o volume de controle da Figura 3.1, na forma diferencial. Assim

$$dS = \frac{1}{T} dQ + s_f dm_f + s_{ad} dm_{ad} + s_{ex} dm_{ex} + d\sigma \quad (3.21)$$

onde

- S – entropia dentro do volume de controle;
- s – entropia específica (por unidade de massa);
- σ – geração de entropia no volume de controle;
- f, ad, ex – referem-se aos fluxos de massa de combustível, de admissão e de exaustão respectivamente.

Multiplicando a Equação 3.21 por T^0 , subtraindo-a da Equação 3.1 e somando a cada lado o termo $p^0 dV$, obtém-se

$$dU + p^0 dV - T^0 dS =$$

$$dQ \left(1 - \frac{T^\circ}{T}\right) - (dW - p^\circ dV) + dm_f (h_f - T^\circ s_f) + \\ dm_{ad} (h_{ad} - T^\circ s_{ad}) + dm_{ex} (h_{ex} - T^\circ s_{ex}) - T^\circ d\sigma \quad (3.22)$$

Combinando esta expressão com a Equação 3.17 na sua forma diferencial, e considerando-se a definição de exergia de fluxo [81]

$$ex_{i,fl} = h_i - T^\circ s_i - \frac{1}{M_i} \mu_i^\circ$$

onde M_i é a massa molecular do fluido que atravessa a superfície de controle; a Equação 3.22 resulta

$$dEx + \left(\sum_{i=1}^m dN_i \mu_i^\circ + \sum_{j=1}^n dN_j \mu_j^\circ - \frac{dm_f}{M_f} \mu_f^\circ - \frac{dm_{ad}}{M_{ad}} \mu_{ad}^\circ - \frac{dm_{ex}}{M_{ex}} \mu_{ex}^\circ \right) = \\ dQ \left(1 - \frac{T^\circ}{T}\right) - (dW - p^\circ dV) + dm_f ex_{f,fl} + \\ dm_{ad} ex_{ad,fl} + dm_{ex} ex_{ex,fl} - T^\circ d\sigma \quad (3.23)$$

Admitindo-se que de uma forma geral, tanto os fluxos de massa através das válvulas como o fluxo de combustível, podem ser tratados como fluxos de substâncias que não estão presentes no meio ambiente mas que podem formar espécies ambientais através de reações do tipo da Equação 3.18, pode-se escrever

$$\mu_j^\circ = \sum_{i=1}^n \nu_{i,j}^P \mu_i^\circ - \sum_{i=1}^n \nu_{i,j}^R \mu_i^\circ \\ \mu_f^\circ = \sum_{i=1}^n \nu_{i,f}^P \mu_i^\circ - \sum_{i=1}^n \nu_{i,f}^R \mu_i^\circ \\ \mu_{ad}^\circ = \sum_{i=1}^n \nu_{i,ad}^P \mu_i^\circ - \sum_{i=1}^n \nu_{i,ad}^R \mu_i^\circ \\ \mu_{ex}^\circ = \sum_{i=1}^n \nu_{i,ex}^P \mu_i^\circ - \sum_{i=1}^n \nu_{i,ex}^R \mu_i^\circ$$

Assim, a expressão entre parênteses no lado esquerdo da Equação 3.23 resulta

$$\sum_{i=1}^n dN_i \mu_i^\circ + \sum_{j=1}^m dN_j \left(\sum_{i=1}^n \nu_{i,j}^P \mu_i^\circ - \sum_{i=1}^n \nu_{i,j}^R \mu_i^\circ \right) - dN_f \left(\sum_{i=1}^n \nu_{i,f}^P \mu_i^\circ - \sum_{i=1}^n \nu_{i,f}^R \mu_i^\circ \right) - \\ dN_{ad} \left(\sum_{i=1}^n \nu_{i,ad}^P \mu_i^\circ - \sum_{i=1}^n \nu_{i,ad}^R \mu_i^\circ \right) - dN_{ex} \left(\sum_{i=1}^n \nu_{i,ex}^P \mu_i^\circ - \sum_{i=1}^n \nu_{i,ex}^R \mu_i^\circ \right)$$

ou, rearranjando

$$\sum_{i=1}^n \mu_i^\circ \left[dN_i + \sum_{j=1}^m dN_j (\nu_{i,j}^P - \nu_{i,j}^R) - dN_f (\nu_{i,f}^P - \nu_{i,f}^R) - \right. \\ \left. dN_{ad} (\nu_{i,ad}^P - \nu_{i,ad}^R) - dN_{ex} (\nu_{i,ex}^P - \nu_{i,ex}^R) \right]$$

os termos entre parênteses nesta expressão, correspondem ao número de moles de i que são produzidos quando um mol de cada espécie j e das substâncias que compõem os fluxos f , ad e ex , são transformados em espécies que estão presentes no meio ambiente. Assim, pode-se escrever

$$\sum_{i=1}^n \mu_i^o \left[dN_i + \sum_{j=1}^m dN_{i,j} - dN_{i,f} - dN_{i,ad} - dN_{i,ex} \right]$$

Considerando-se que o número de moles N_i diminui quando N_j aumenta e que um aumento dos fluxos de massa que atravessam a superfície de controle provocam um aumento de N_i , pode-se escrever

$$dN_i = - \sum_{j=1}^m dN_{i,j} + dN_{i,f} + dN_{i,ad} + dN_{i,ex}$$

Inserindo esta expressão na anterior, obtém-se que o termo entre parênteses na Equação 3.23 é identicamente nulo. Assim, a Equação 3.23 pode então ser escrita na seguinte forma

$$dEx = dEx_Q - dEx_W + dEx_f + dEx_{ad} + dEx_{ex} - dI \quad (3.24)$$

nesta equação

$$dEx_Q = dQ \left(1 - \frac{T^o}{T} \right)$$

$$dEx_W = dW - p^o dV$$

$$dEx_f = dm_f ex_{f,fl}$$

$$dEx_{ad} = dm_{ad} ex_{ad,fl}$$

$$dEx_{ex} = dm_{ex} ex_{ex,fl}$$

$$dI = T^o d\sigma$$

onde

- dEx – variação da exergia dentro do volume de controle;
- dEx_Q – transmissão de exergia, associada à transferência de calor para dentro do volume de controle;
- dEx_W – transmissão de exergia, associada à produção de trabalho;
- dEx_f – variação da exergia dentro do volume de controle, associada ao fluxo de combustível;
- dEx_{ad} – variação de exergia dentro do volume de controle, associada ao fluxo de massa através da válvula de admissão;
- dEx_{ex} – variação de exergia dentro do volume de controle, associada ao fluxo de massa através da válvula de escape;
- dI – variação da exergia dentro do volume de controle, decorrente da destruição por irreversibilidades;

A Equação 3.24 expressa o balanço de exergia dentro do volume de controle.

Capítulo 4

Análise do Escoamento nos Dutos de Admissão e Escape

4.1 Introdução.

Para o funcionamento dos motores de combustão interna, é preciso que a cada ciclo os gases queimados durante o processo de combustão sejam evacuados do cilindro para assim permitir a entrada de *carga fresca*. Isto é feito durante o período de *intercâmbio de gases*, o qual inclui os processos de admissão e escape. Ambos estes processos se influenciam mutuamente e esta interdependência deve-se não só ao fato que eles podem ocorrer simultaneamente durante um determinado período, mas também porque a quantidade de carga que ingressa no cilindro é determinada, em certa medida, pela eficiência com que é feita a lavagem durante o processo de escape. Assim, a análise dos processos de admissão e escape deve ser feita examinando-se de forma conjunta todos os fenômenos relacionados ao intercâmbio de gases.

Nos motores diesel automotivos de quatro tempos, o processo de escape se inicia ainda durante o processo de expansão, entre 30 e 70 graus de ângulo de manivela antes que o pistão atinja o ponto morto inferior (PMI) [44]. No momento de abertura da válvula de escape, a pressão no cilindro é de 3–8 bar enquanto que no coletor a pressão é próxima à atmosférica. Assim, a relação de pressões entre o cilindro e o coletor de escape excede o valor crítico (aproximadamente igual a 1.85) o que determina que a velocidade do gás seja crítica na seção onde a área do escoamento é mínima (aproximadamente 550–720 m/s [82]). A medida que diminui a diferença de pressões entre as seções à montante e à jusante da válvula, a velocidade do gás na seção de garganta passa a ser sub-sônica. No início do processo de escape, na região do duto adjacente à válvula, se forma uma onda de pressão de grande amplitude, a qual se propaga ao longo do coletor e se reflete nas seções onde se têm junções, variações bruscas da área de passagem, ou nos extremos dos dutos. A propagação de ondas de pressão e rarefação ao longo dos dutos podem favorecer ou não o desenvolvimento do processo, dependendo das características dinâmicas dos coletores e do regime

de funcionamento do motor. Por isso, é importante que este fenômeno seja levando em conta durante a análise dos processos de intercâmbio de gases. A exaustão ocorre de forma espontânea enquanto o pistão se desloca na direção do PMI. Quando o PMI é alcançado, inicia-se a exaustão forçada, durante a qual os gases são desalojados pelo pistão. Ao longo do período de exaustão forçada, a pressão e a temperatura no cilindro se mantêm praticamente constantes. Este período continua até que o pistão chegue ao ponto morto superior (PMS), mas a válvula de exaustão se fecha só alguns graus depois que o pistão atinge o PMS.

O processo de admissão é iniciado antes que o pistão chegue ao PMS, quando a válvula de escape ainda está aberta. Assim, existe um intervalo de tempo quando os dois processos transcorrem simultaneamente. Este é o chamado *período de superposição de válvulas*. A duração deste período, em termos do ângulo de manivela, é essencialmente diferente para os motores de aspiração natural e os turboalimentados. No primeiro caso, a abertura da válvula de admissão ocorre quando a pressão no cilindro é maior que a pressão no coletor de admissão. Isto determina que os produtos de combustão que se encontram no cilindro, escoem tanto para o coletor de escape como para o de admissão. Esta situação se mantém enquanto a pressão no cilindro não seja menor que a pressão no coletor de admissão. Para evitar que ingresse uma grande quantidade de gases queimados no coletor de admissão, é usual escolher um ângulo de cruzamento de válvulas pequeno em comparação com aqueles praticados nos motores turboalimentados. No caso destes motores, no instante se abertura da válvula de admissão, a pressão no coletor de admissão geralmente é maior que a pressão no cilindro e no coletor de escape. Isto garante a entrada de ar no cilindro já desde o início da abertura da válvula, e permite que os gases queimados continuem saindo para o coletor de escape até o fechamento da válvula de exaustão, evitando-se assim o escoamento reverso. O ar que entra no cilindro durante o período de superposição de válvulas, se mistura com os gases queimados e, como a válvula de escape ainda está aberta, uma parte dessa mistura acaba caindo no coletor de escape. Assim, a massa de ar que se encontra no cilindro no final do processo de admissão resulta ser menor que a massa total admitida. Em compensação, o processo de intercâmbio de gases nos motores turboalimentados permite diminuir a massa de gases residuais e reduzir a carga térmica sobre as superfícies internas do cilindro. Por isso, o ângulo de cruzamento de válvulas nos motores turboalimentados é maior que nos motores de aspiração natural.

Os processos de admissão e exaustão descritos acima, determinam parâmetros tais como a eficiência volumétrica, a fração de gases residuais e o trabalho de bombeamento, e estes por sua vez influenciam diretamente os índices de desempenho e eficiência do motor. Daí a importância de se dispor de ferramentas adequadas que permitam modelar estes processos com a precisão requerida.

Na literatura são encontradas três formas diferentes de se abordar a modelagem dos processos de admissão e escape. A diferença fundamental entre estas abordagens reside na forma de se tratar as propriedades do escoamento nas

tubulações — se é admitida a hipótese que estas propriedades são (1) *constantes*; (2) *uniformes* (variam apenas em função do tempo); ou (3) *variáveis* no tempo e no espaço.

Os modelos nos quais se admite que as propriedades dos gases nos coletores são constantes, são conhecidos como *quase-estacionários* [83]. Nesses modelos não se leva em conta a natureza intermitente dos processos de admissão e escape e são utilizados valores médios para a pressão e temperatura nos coletores. Além disso, admite-se que o volume dos coletores é desprezível, o que permite que os efeitos de acumulação de massa sejam desconsiderados. Uma vez que as equações que resultam da aplicação destes modelos são algébricas, pode-se anotar que a principal vantagem que eles oferecem reside na sua simplicidade e na possibilidade de se efetuar simulações rápidas. No entanto, para produzir resultados confiáveis, estes modelos precisam ser auxiliados por coeficientes de ajuste determinados através de experimentos. Os modelos quase-estacionários têm sido utilizados para sintonizar o funcionamento de motores com turbocompressores, e para modelamento dinâmico em tempo real de motores de ciclo combinado. Além disso, dada a sua simplicidade, estes modelos são geralmente incluídos em simulações do ciclo completo que não enfatizam nos processos de admissão e escape. Nas referências [29, 83, 84, 85] podem ser encontrados exemplos da aplicação destes modelos.

O método de *carga-descarga* [86] integra o segundo grupo de abordagens encontradas na literatura. Neste método os coletores são tratados como recipientes que possuem volumes finitos e portanto são capazes de acumular massa. As propriedades do gás que se encontra nos coletores são consideradas uniformes no volume todo, mas estão sujeitas a variações em função do tempo. A aplicação deste método leva à solução de um conjunto de equações diferenciais ordinárias que descrevem as condições nos diferentes elementos considerados (cilindro, coletor, turbocompressor, etc.). Estes métodos são apropriados para simular os processos de admissão e escape em motores turboalimentados nos quais os efeitos da propagação de ondas são pouco relevantes. O método de *carga-descarga* vêm sendo intensamente utilizado na indústria, pois ele permite realizar análises paramétricas suficientemente rápidas e confiáveis. As referências [21] e [86] mostram exemplos da aplicação deste método.

No terceiro grupo de abordagens se incluem os modelos baseados na solução das equações em derivadas parciais que governam a propagação de perturbações em um meio compressível [87, 88]. O trabalho pioneiro que descreve a solução destas equações nos dutos de admissão e escape dos motores deve-se a Jenny [89], que utilizou uma solução gráfica do método das *curvas características*. Soluções deste tipo são apresentadas também nos trabalhos [87, 90, 91]. A enorme demanda de tempo e a sua natureza tediosa mostraram que esse método de solução está distante do limite prático. Cientes desses inconvenientes, Benson *et alii* [87, 92] modificaram o método das curvas características de forma tal que a solução das equações governantes foi obtida em pontos fixos de uma malha de cálculo, o que tornou possível a solução das equações com ajuda de computadores. Os trabalhos publicados por Benson e

colaboradores [93, 94, 95] mostram que o esquema de solução proposto por esse autor oferece bons resultados para motores de uma ampla faixa de tamanhos e configurações. No entanto, sabe-se que a maior desvantagem do método de malha proposto por Benson, está na sua incapacidade de representar acuradamente descontinuidades na distribuição de pressão (ondas de choque) [96]. Embora este inconveniente não seja relevante para o caso dos motores diesel, nos quais é improvável que tais fenômenos ocorram, ele pode ser muito importante no caso dos motores de ignição por centelha que trabalham a altas rotações e apresentam difusores nos coletores. Outros exemplos de aplicação da solução numérica dos métodos que incluem os efeitos da propagação de ondas podem ser encontrados nas referências [96, 97, 98, 99, 100, 101].

Os modelos baseados na análise da propagação de ondas são apropriados para simular o processo de admissão dos motores de aspiração natural, uma vez que nesse caso os efeitos desta propagação se tornam relevantes em virtude das pequenas diferenças de pressão verificadas durante este processo. Estes efeitos são também importantes no coletor de escape tanto dos motores turboalimentados como os de aspiração natural, uma vez que no início deste processo são gerados pulsos de pressão de grande amplitude, os quais podem influenciar marcadamente o escoamento. Em geral, pode-se afirmar que quanto maior o comprimento dos dutos que conformam os coletores, maior a influência que os fenômenos de propagação de ondas exercem sobre o escoamento. Deve-se destacar ainda que a análise da propagação de perturbações nos dutos permite determinar as dimensões dos coletores que melhor se adequam aos requerimentos para um ótimo desempenho do motor.

Os modelos de propagação de ondas geralmente se limitam a uma dimensão espacial e portanto não são capazes de descrever os efeitos bi e tridimensionais causados pela presença de válvulas, junções e variações bruscas da área de passagem do escoamento. Estes efeitos devem ser incluídos através de sub-modelos que consideram a variação das propriedades do escoamento nos trechos onde são relevantes esses efeitos multidimensionais [102, 103].

4.2 As Equações Governantes.

Para a análise dos escoamentos nos dutos de admissão e escape, são feitas as seguintes considerações:

- Admite-se que o fluido é compressível;
- O escoamento é tratado como sendo unidimensional, não estacionário e não isentrópico;
- A área transversal dos dutos pode variar em função da coordenada espacial;

- Os efeitos da transferência de calor e atrito entre o fluido e as paredes dos coletores, são levados em conta;
- A variação da constante dos gases e dos calores específicos do fluido, pode ser desprezada.

A Figura 4.1 mostra um elemento do duto, para o qual são deduzidas as equações de balanço de massa, quantidade de movimento e energia

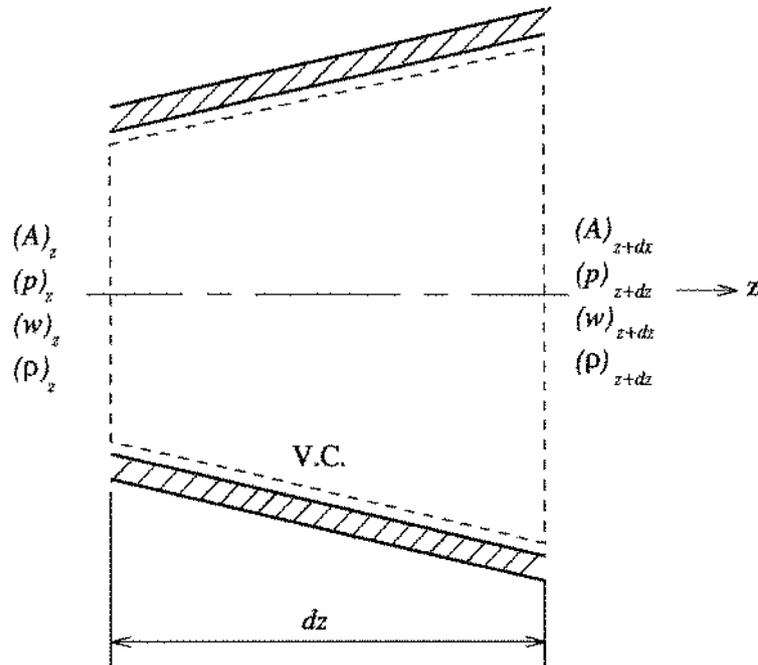


Figura 4.1: Volume de controle para análise do escoamento.

4.2.1 Balanço de Massa.

A equação de continuidade estabelece que a taxa de acumulação de massa no volume de controle é igual ao fluxo líquido de massa para dentro da superfície de controle (fluxo menos efluxo). Assim

$$\frac{\partial(\rho A dz)}{\partial t} = \rho A w - \left(\rho + \frac{\partial \rho}{\partial z} dz\right) \left(A + \frac{\partial A}{\partial z} dz\right) \left(w + \frac{\partial w}{\partial z} dz\right)$$

Efetuando a multiplicação do lado direito desta equação e desprezando os termos que contém dz^2 e dz^3 , obtém-se

$$\frac{\partial(\rho A dz)}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho w A)}{\partial z} dz$$

Desenvolvendo o lado esquerdo desta equação e levando em conta que a área transversal A depende só da variável espacial z , resulta

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + w \frac{\partial \rho}{\partial z} + \rho \frac{\partial w}{\partial z} + \rho w \frac{1}{A} \frac{dA}{dz} = 0 \quad (4.1)$$

4.2.2 Balanço de Quantidade de Movimento.

A taxa de variação da quantidade de movimento dentro do volume de controle é igual à força resultante \mathcal{F} que atua sobre a superfície de controle, mais o fluxo líquido de quantidade de movimento para o interior do volume de controle (fluxo menos efluxo). Assim,

$$\frac{\partial(\rho A dz w)}{\partial t} = \mathcal{F} + \rho A w^2 - \left(\rho + \frac{\partial \rho}{\partial z} dz\right) \left(A + \frac{\partial A}{\partial z} dz\right) \left(w + \frac{\partial w}{\partial z} dz\right)^2$$

Efetuada a multiplicação do lado direito e desprezando os termos que contém dz^2 , dz^3 e dz^4 , resulta

$$\frac{\partial(\rho A dz w)}{\partial t} = \mathcal{F} - \frac{\partial(\rho w^2 A)}{\partial z} dz \quad (4.2)$$

A resultante \mathcal{F} é calculada somando-se as forças que atuam sobre a superfície de controle, como mostrado na Figura 4.2.

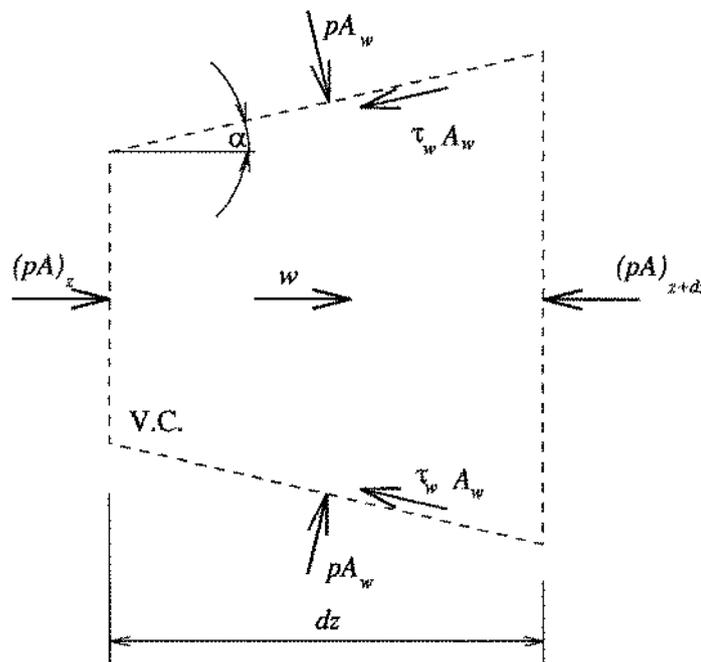


Figura 4.2: Forças que atuam sobre a superfície de controle.

Levando-se em conta que a tensão de cisalhamento na parede (τ_w) e a pressão (p) atuam na área correspondente à superfície lateral do ducto (A_w), e que a componente radial destas forças é compensada por simetria, pode-se escrever

$$\mathcal{F} = p A + p A_w \sin \alpha - \left(p + \frac{\partial p}{\partial z} dz\right) \left(A + \frac{dA}{dz} dz\right) - \frac{|w|}{w} \tau_w A_w \cos \alpha$$

onde o fator $\frac{|w|}{w}$ foi introduzido para indicar que a força de atrito ($\tau_w A_w$) se direciona no sentido oposto à velocidade do fluido.

A expressão $(A_w \sin \alpha)$ representa a projeção da área lateral A_w no plano perpendicular ao eixo do duto, a qual é igual à diferença das áreas transversais nas posições $z + dz$ e z . Dessa forma resulta

$$A_w \sin \alpha = \frac{dA}{dz} dz$$

Substituindo esta equação na expressão anterior e levando-se em conta a relação $A_w = \pi D_d dz / \cos \alpha$, onde D_d é o diâmetro do duto, resulta

$$\mathcal{F} = -A \frac{\partial p}{\partial z} dz - \frac{|w|}{w} \tau_w \pi D_d dz$$

Inserindo esta equação em 4.2, obtém-se

$$\frac{\partial(\rho w A dz)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho w^2 A)}{\partial z} dz + A \frac{\partial p}{\partial z} dz + \frac{|w|}{w} \tau_w \pi D_d dz = 0$$

Combinando esta expressão com a Equação 4.1, resulta

$$\frac{\partial w}{\partial t} + w \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + F = 0 \quad (4.3)$$

$$F = f_{atr} \frac{4}{D_d} \frac{|w|}{w} \frac{w^2}{2}$$

onde f_{atr} é o coeficiente de atrito definido da seguinte forma

$$f_{atr} = \frac{\tau_w}{\rho \frac{w^2}{2}}$$

4.2.3 Balanço de Energia.

A Primeira Lei da Termodinâmica estabelece que a taxa de variação da energia dentro do volume de controle $(\partial E / \partial t)$ é igual à taxa de transferência de calor para dentro do mesmo $(\partial Q / \partial t)$, descontada a taxa de produção de trabalho pela superfície de controle $(\partial W / \partial t)$ e acrescida do fluxo líquido de entalpia de estagnação $(h_e \dot{m}_e - h_s \dot{m}_s)$

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{\partial Q}{\partial t} - \frac{\partial W}{\partial t} + h_e \dot{m}_e - h_s \dot{m}_s \quad (4.4)$$

onde

- \dot{m} – fluxo de massa através da superfície de controle;
- h – entalpia de estagnação por unidade de massa;
- e, s – referem-se aos fluxos de entrada e saída respectivamente.

O termo do lado esquerdo da equação acima inclui tanto a energia interna u como a energia cinética do fluido. Assim,

$$E = \rho A dz \left(u + \frac{w^2}{2} \right)$$

A taxa de transferência de calor $\partial Q/\partial t$, pode ser escrita em termos da taxa de transferência de calor por unidade de massa \dot{q} , na seguinte forma

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \dot{q}\rho A dz$$

Como as paredes do duto são rígidas, a taxa de produção de trabalho resulta nula. Além disso, as entalpias de estagnação de entrada e saída, e os fluxos de massa através da superfície de controle são expressos pelas seguintes equações

$$\begin{aligned} h_e &= u + \frac{w^2}{2} + \frac{p}{\rho} \\ h_s &= \left(u + \frac{w^2}{2} + \frac{p}{\rho} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(u + \frac{w^2}{2} + \frac{p}{\rho} \right) dz \\ \dot{m}_e &= \rho w A \\ \dot{m}_s &= \left(\rho + \frac{\partial \rho}{\partial z} dz \right) \left(w + \frac{\partial w}{\partial z} dz \right) \left(A + \frac{dA}{dz} dz \right) \end{aligned}$$

Inserindo estas expressões na Equação 4.4 e rearranjando, obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho A dz \left(u + \frac{w^2}{2} \right) \right) = \dot{q}\rho A dz - \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho w A \left(u + \frac{w^2}{2} + \frac{p}{\rho} \right) \right)$$

Efetuando-se as derivadas e levando em conta as equações de balanço de massa e de quantidade de movimento (Equações 4.1 e 4.3), resulta

$$\frac{\partial u}{\partial t} + w \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{p}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + w \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) - (\dot{q} + wF) = 0 \quad (4.5)$$

Esta equação pode ser expressa em termos da entropia utilizando a seguinte relação termodinâmica

$$T ds = du + p d \left(\frac{1}{\rho} \right) \quad (4.6)$$

Dividindo esta equação por dt e levando em conta que a derivada total de uma propriedade em relação ao tempo pode ser expressa em termos das derivadas parciais na seguinte forma

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + w \frac{\partial}{\partial z}$$

obtém-se

$$T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + w \frac{\partial s}{\partial z} \right) = \frac{\partial u}{\partial t} + w \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{p}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + w \frac{\partial \rho}{\partial z} \right)$$

Desta equação e de 4.5 resulta

$$\frac{\partial s}{\partial t} + w \frac{\partial s}{\partial z} = \frac{kR}{c^2} (\dot{q} + wF) \quad (4.7)$$

onde k é a relação de calores específicos C_p/C_v , e $c = \sqrt{kRT}$ é velocidade do som no fluido.

4.3 A Natureza Hiperbólica do Problema.

O sistema de equações diferenciais de primeira ordem, formado pelas equações de balanço de massa, de quantidade de movimento e de energia (Equações 4.1, 4.3 e 4.7), pode ser escrito em função das derivadas da velocidade, da pressão e da entropia, valendo-se da relação termodinâmica 4.6, da equação de estado $p/\rho = RT$ e da expressão para a velocidade do som $c^2 = kRT$, das quais resulta

$$dp = \frac{p}{C_v} ds + c^2 d\rho \quad (4.8)$$

Escrevendo esta relação em termos das derivadas parciais e levando em conta a Equação 4.7 obtém-se

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + w \frac{\partial \rho}{\partial z} = \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + w \frac{\partial p}{\partial z} \right) - \frac{\rho}{c^2} (k-1) (\dot{q} + wF)$$

Com esta expressão, a equação de balanço de massa resulta

$$\frac{\partial p}{\partial t} + w \frac{\partial p}{\partial z} + c^2 \rho \frac{\partial w}{\partial z} = \rho (k-1) (\dot{q} + wF) - \frac{\rho w c^2}{A} \frac{dA}{dz} \quad (4.9)$$

Assim, o sistema de equações diferenciais pode ser escrito na seguinte forma

$$\begin{aligned} 1 \frac{\partial p}{\partial t} + 0 \frac{\partial w}{\partial t} + 0 \frac{\partial s}{\partial t} + w \frac{\partial p}{\partial z} + \rho c^2 \frac{\partial w}{\partial z} + 0 \frac{\partial s}{\partial z} &= \rho (k-1) (\dot{q} + wF) - \frac{\rho w c^2}{A} \frac{dA}{dz} \\ 0 \frac{\partial p}{\partial t} + 1 \frac{\partial w}{\partial t} + 0 \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + w \frac{\partial w}{\partial z} + 0 \frac{\partial s}{\partial z} &= -F \\ 0 \frac{\partial p}{\partial t} + 0 \frac{\partial w}{\partial t} + 1 \frac{\partial s}{\partial t} + 0 \frac{\partial p}{\partial z} + 0 \frac{\partial w}{\partial z} + w \frac{\partial s}{\partial z} &= \frac{kR}{c^2} (\dot{q} + wF) \end{aligned}$$

ou, na forma matricial

$$\frac{\partial U}{\partial t} + A \frac{\partial U}{\partial z} = f \quad (4.10)$$

onde

$$U = \begin{pmatrix} p \\ w \\ s \end{pmatrix} ; \quad A = \begin{pmatrix} w & c^2 \rho & 0 \\ 1/\rho & w & 0 \\ 0 & 0 & w \end{pmatrix} ;$$

$$f = \begin{pmatrix} \rho (k-1) (\dot{q} + wF) - \rho w \frac{c^2}{A} \frac{dA}{dz} \\ -F \\ \frac{kR}{c^2} (\dot{q} + wF) \end{pmatrix}$$

Este sistema é linear em relação as derivadas do vetor U , por isso se diz que ele é *quase-linear* [104]. Os sistemas quase-lineares da forma da Equação 4.10 nos quais a matriz de coeficientes A tem auto-valores reais e diferentes, são

chamados de *sistemas hiperbólicos* [105]. Os auto-valores γ_i da matriz \mathbf{A} são definidos como as raízes da equação característica

$$\det(\mathbf{A} - \gamma \mathbf{I}) = 0 \quad (4.11)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade. Assim, tem-se que

$$\det \begin{pmatrix} w - \gamma & c^2 \rho & 0 \\ 1/\rho & w - \gamma & 0 \\ 0 & 0 & w - \gamma \end{pmatrix} = 0$$

de onde resulta

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= w + c \\ \gamma_2 &= w - c \\ \gamma_3 &= w \end{aligned}$$

Uma vez que os auto-valores γ_i são reais e diferentes, o sistema dado pela Equação 4.10 é hiperbólico.

Diversos métodos podem ser utilizados para se resolver os sistemas hiperbólicos. Dentre esses métodos, as técnicas em diferenças finitas baseadas no esquema de Lax-Wendroff [106] e o método das *curvas características* [104] são provavelmente os mais difundidos. Ames [107] destaca que os métodos em diferenças finitas são apropriados para os casos em que se sabe que as soluções são “bem comportadas” no domínio de cálculo. Kruglov e Mednov [82] anotam que no caso dos escoamentos nos dutos de admissão e escape, onde ocorrem variações abruptas das propriedades do fluido, o método das características tem permitido obter resultados mais precisos. Entretanto, Kruglov e Mednov também ressaltam que a estrutura lógica dos códigos computacionais desenvolvidos usando-se o método das características, geralmente resulta extremamente complicada. Apesar desta advertência, neste trabalho optou-se por adotar o método das características para dar solução ao sistema expresso pela Equação 4.10.

O conceito de *hiper-superfícies características* ocupa um lugar de destaque na teoria matemática das equações hiperbólicas. Em particular, no caso de problemas definidos no plano (x, t) , estas hiper-superfícies são referidas como *curvas características*. Neste tipo de problemas, estas curvas constituem o sistema de coordenadas naturais, no qual as equações em derivadas parciais definidas em todo o domínio podem ser re-expressas como equações diferenciais ordinárias definidas ao longo das curvas características.

A importância das curvas características nos problemas hiperbólicos deve-se às propriedades analíticas inerentes às soluções deste tipo de problemas. Especificamente, deve-se a que estas soluções podem propagar descontinuidades geradas nas fronteiras do domínio. Assim, quando tais descontinuidades existem, elas são transportadas para o interior do domínio através das curvas características. Entretanto, estas curvas são capazes de propagar, também, elementos de uma solução diferenciável.

Na seção seguinte são deduzidas as equações das curvas características e as relações funcionais verificadas ao longo delas.

4.4 As Equações das Curvas Características.

O conceito de *curvas características* está intimamente ligado à solução do problema de Cauchy para o sistema dado pela Equação 4.10, o qual pode ser enunciado na seguinte forma — supondo que os valores do vetor U sejam conhecidos em todos os pontos de uma curva L pertencente ao domínio $\Lambda(z, t)$, sobre o qual se deseja construir a solução, pede-se determinar os valores de U nas vizinhanças de L .

Deve ser observado que para achar o valor de uma função nas vizinhanças de um ponto em uma direção qualquer, basta que nesse ponto sejam conhecidos os valores da função e das suas derivadas em duas direções ortogonais. Em particular, o problema de Cauchy enunciado acima pode ser resolvido se se conhecem as derivadas $\partial U/\partial t$ e $\partial U/\partial z$ em todos os pontos da curva L .

Para determinar estas derivadas, deve-se levar em consideração as seguintes expressões para o diferencial das variáveis dependentes ao longo da curva L .

$$\begin{aligned}\frac{\partial p}{\partial t} dt + \frac{\partial p}{\partial z} dz &= dp \\ \frac{\partial w}{\partial t} dt + \frac{\partial w}{\partial z} dz &= dw \\ \frac{\partial s}{\partial t} dt + \frac{\partial s}{\partial z} dz &= ds\end{aligned}$$

ou, na forma matricial

$$dt \mathbf{I} \frac{\partial U}{\partial t} + dz \mathbf{I} \frac{\partial U}{\partial z} = dU$$

Além disso, uma vez que as equações de balanço devem ser satisfeitas em todo o domínio, particularmente ao longo da curva L , o seguinte sistema deve ser resolvido

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial U}{\partial z} &= \mathbf{f} \\ dt \mathbf{I} \frac{\partial U}{\partial t} + dz \mathbf{I} \frac{\partial U}{\partial z} &= dU\end{aligned}\tag{4.12}$$

Este sistema tem solução sempre que o determinante da matriz de coeficientes seja diferente de zero. No entanto, pode acontecer que a curva L seja tal que os diferenciais dz e dt ao longo dela façam que este determinante se anule. Tais curvas, nas quais se verifica que

$$\det \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{A} \\ dt \mathbf{I} & dz \mathbf{I} \end{pmatrix} = 0$$

são chamadas de *características* do sistema dado pela Equação 4.10. Resolvendo esta equação obtém-se

$$\det\left(\mathbf{A} - \frac{dz}{dt} \mathbf{I}\right) = 0$$

De onde pode-se verificar que as derivadas dz/dt das curvas características são os auto-valores da matriz \mathbf{A} , já obtidos resolvendo-se a Equação 4.11. Assim, as equações das curvas características resultam

$$\frac{dz}{dt} = w + c \quad (4.13)$$

$$\frac{dz}{dt} = w - c \quad (4.14)$$

$$\frac{dz}{dt} = w \quad (4.15)$$

Aqui, as duas primeiras equações correspondem às chamadas *linhas de Mach*, entanto que a terceira é a equação da trajetória das partículas.

Apesar de o determinante da matriz de coeficientes ser nulo, o sistema dado pelas Equações 4.12 deve ter solução, pois existe uma solução do sistema 4.10 no domínio Λ do qual faz parte a curva L . Isto significa que o posto (*rank*) da matriz ampliada

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{A} & \mathbf{f} \\ dt \mathbf{I} & dz \mathbf{I} & d\mathbf{U} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & w & c^2 \rho & 0 & \rho(k-1)(\dot{q} + wF) - \rho w \frac{c^2}{A} \frac{dA}{dz} \\ 0 & 1 & 0 & 1/\rho & w & 0 & -F \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & w & \frac{kR}{c^2}(\dot{q} + wF) \\ dt & 0 & 0 & dz & 0 & 0 & dp \\ 0 & dt & 0 & 0 & dz & 0 & dw \\ 0 & 0 & dt & 0 & 0 & dz & ds \end{pmatrix}$$

deve ser igual ao posto da matriz de coeficientes. Ou, o que é o mesmo, o determinante de todas as matrizes formadas por seis colunas da matriz ampliada, deve ser igual a zero. Assim, por exemplo igualando a zero o determinante da matriz que resulta eliminando a quinta coluna da matriz ampliada, obtém-se

$$(dz - w dt) \left(Fw dt^2 + (k-1)(wF + \dot{q}) dt^2 - \frac{wc^2}{A} \frac{dA}{dz} dt^2 - (F dz + \frac{dp}{\rho}) dt - dw (dz - w dt) \right) = 0$$

O diferencial dz que aparece nesta equação pode ser substituído a partir das Equações 4.13, 4.14 e 4.15. Assim, é possível obter para cada curva característica, uma *equação de compatibilidade* ao longo dela, que virá expressar a condição necessária para que o sistema dado pela Equação 4.12 tenha solução ao longo da característica.

Quando se trata das linhas de trajetória, verifica-se que o primeiro fator na equação acima é identicamente zero, então nesse caso a condição de determinante nulo fica satisfeita. Já no caso das linhas de Mach, o primeiro fator

resulta igual a $+c dt$ para a linha dada pela Equação 4.13, e $-c dt$ para a segunda linha de Mach, portanto, é diferente de zero. Isto significa que o segundo fator deve ser igualado a zero. Assim, resulta

$$(dw)_{mach} = \mp \frac{1}{\rho c} (dp)_{mach} + \left(\mp \frac{wc}{A} \frac{dA}{dz} \pm (k-1) \frac{\dot{q}}{c} - F \pm F \frac{w}{c} (k-1) \right) dt$$

onde os sinais superior e inferior referem-se às linhas de Mach dadas pelas Equações 4.13 e 4.14 respectivamente.

Igualando a zero o determinante da matriz que resulta ao eliminar a sexta coluna da matriz ampliada, obtém-se

$$\left(ds - \frac{kR}{c^2} (\dot{q} + wF) dt \right) (dz - (w+c) dt) (dz - (w-c) dt) = 0$$

De onde resulta a seguinte equação de compatibilidade ao longo das linhas de trajetória

$$(ds)_{path} = \frac{kR}{c^2} (\dot{q} + wF) dt \quad (4.16)$$

Os mesmos resultados são obtidos igualando a zero os determinantes das outras quatro matrizes que ainda podem ser formadas.

Na equação de compatibilidade ao longo das linhas de Mach, o termo que contém o diferencial de pressão pode ser substituído, a partir da seguinte equação que resulta da combinação da relação termodinâmica 4.6, a equação de estado $p/\rho = RT$ e a expressão para a velocidade do som $c^2 = kRT$

$$\frac{1}{\rho} dp = \frac{2c}{k-1} dc - \frac{c^2}{kR} ds$$

Tomando os diferenciais ao longo das linhas de Mach, substituindo o valor de $(dp)_{mach}$ na equação de compatibilidade e multiplicando por $\pm(k-1)/2$, obtém-se

$$\begin{aligned} (dc)_{mach} \pm \frac{k-1}{2} (dw)_{mach} &= \frac{k-1}{2} \frac{c}{kR} (ds)_{mach} + \\ &+ \frac{k-1}{2} \left(-\frac{wc}{A} \frac{dA}{dz} + (k-1) \frac{1}{c} (\dot{q} + wF) \mp F \right) dt \end{aligned} \quad (4.17)$$

4.4.1 Adimensionalização das Equações.

Através da definição de um estado de referência do fluido e de um comprimento de referência z_{ref} , é possível expressar as equações das curvas características e de compatibilidade, na forma adimensional.

A adimensionalização é feita tanto para manter os erros de truncamento e arredondamento em níveis uniformes, como também para manter os limites de variação dos parâmetros envolvidos na solução numérica das equações, dentro de uma faixa de valores que evite o surgimento de números excessivamente

grandes ou demasiadamente pequenos, os quais podem causar falha na execução dos cálculos no computador.

No caso dos motores, as condições na entrada do duto de admissão, e na saída do duto de escape podem ser adotadas como condições de referência para os escoamentos de admissão e escape respectivamente.

As variáveis adimensionais são definidas da seguinte maneira

$$\begin{aligned} t &= \frac{c_{ref}}{z_{ref}} t \\ z &= \frac{z}{z_{ref}} \\ c &= \frac{c}{c_{ref}} \\ w &= \frac{w}{c_{ref}} \\ s &= \frac{s - s_{ref}}{R} \end{aligned}$$

De onde as equações adimensionalizadas resultam

Linhas de Mach.

$$dz = (w \pm c) dt \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} (dc)_{mach} \pm \frac{k-1}{2} (dw)_{mach} &= \frac{k-1}{2} \frac{c}{k} (ds)_{mach} + \\ &+ \frac{k-1}{2} \left(-\frac{wc}{A} \frac{dA}{dz} + (k-1) \frac{1}{c} (\dot{q} + wF) \mp F \right) dt \end{aligned} \quad (4.19)$$

Linha de trajetória.

$$dz = w dt \quad (4.20)$$

$$(ds)_{path} = \frac{k}{c^2} (\dot{q} + wF) dt \quad (4.21)$$

nestas equações,

$$\begin{aligned} F &= f_{atr} \frac{4z_{ref}}{D_d} \frac{|w|}{w} \frac{w^2}{2} \\ \dot{q} &= \dot{q} \frac{z_{ref}}{c_{ref}^3} \end{aligned}$$

4.4.2 As Variáveis de Riemann.

Nas equações de compatibilidade correspondentes às linhas de Mach, aparecem os diferenciais da velocidade adimensional dw , da velocidade do som adimensional dc e da entropia adimensional ds . É possível conseguir que apenas

dois diferenciais apareçam nestas equações, fazendo a seguinte substituição de variáveis. Seja

$$d\lambda = dc + \frac{k-1}{2} dw$$

$$d\beta = dc - \frac{k-1}{2} dw$$

Integrando estas equações, obtém-se

$$\lambda = c + \frac{k-1}{2} w \quad (4.22)$$

$$\beta = c - \frac{k-1}{2} w \quad (4.23)$$

De onde

$$c = \frac{\lambda + \beta}{2} \quad (4.24)$$

$$w = \frac{\lambda - \beta}{k-1} \quad (4.25)$$

As variáveis λ e β , são chamadas de *variáveis de Riemann*. Como a variável λ aparece na equação de compatibilidade ao longo da linha de Mach definida pela Equação 4.13, esta linha é frequentemente chamada de λ -*característica*. Analogamente, a linha de Mach definida pela Equação 4.14, é chamada de β -*característica*.

As equações de compatibilidade ao longo das linhas de Mach podem agora ser escritas em termos das variáveis λ e β assim

$$(d\lambda)_\lambda = \frac{k-1}{2k} c (ds)_\lambda + \frac{k-1}{2} \left(-\frac{wc}{A} \frac{dA}{dz} + \frac{k-1}{c} (\dot{q} + wF) - F \right) dt \quad (4.26)$$

$$(d\beta)_\beta = \frac{k-1}{2k} c (ds)_\beta + \frac{k-1}{2} \left(-\frac{wc}{A} \frac{dA}{dz} + \frac{k-1}{c} (\dot{q} + wF) + F \right) dt \quad (4.27)$$

4.4.3 A Variável Nível de Entropia.

A partir dos trabalhos de Benson [87, 92, 93, 94, 95, 108], é habitual expressar as equações de compatibilidade ao longo das curvas características em função da variável *nível de entropia* (c_A). Embora esse autor não tenha dado uma interpretação física desta variável, ela pode ser definida como a velocidade do som no fluido, no estado que seria atingido através de uma expansão isentrópica até a pressão de referência p_{ref} .

Partindo desta definição, é possível deduzir uma relação entre a entropia e o nível de entropia, levando em conta que para a expansão isentrópica até a pressão p_{ref} , a seguinte equação é válida

$$\frac{p}{p_{ref}} = \left(\frac{\rho}{\rho_A} \right)^k$$

onde o subscrito A é utilizado para as propriedades no estado final. Diferenciando esta equação e as expressões para a velocidade do som nos estados inicial e final, $c^2 = kp/\rho$ e $c_A^2 = kp_{ref}/\rho_A$, obtém-se

$$\frac{1}{p} dp = \frac{k}{\rho} d\rho - \frac{k}{\rho_A} d\rho_A \quad (4.28)$$

$$\frac{2}{c} dc = \frac{1}{p} dp - \frac{1}{\rho} d\rho \quad (4.29)$$

$$\frac{2}{c_A} dc_A = -\frac{1}{\rho_A} d\rho_A \quad (4.30)$$

Combinando estas equações com a relação termodinâmica 4.8 é possível obter

$$\frac{ds}{R} = \frac{2k}{k-1} \frac{dc_A}{c_A}$$

Integrando esta equação entre o estado de referência e as condições locais do fluido, resulta

$$\frac{s - s_{ref}}{R} = \frac{2k}{k-1} \ln \frac{c_A}{c_{A,ref}}$$

Considerando a forma adimensional da entropia e que, pela definição de nível de entropia $c_{A,ref} = c_{ref}$, obtém-se

$$s = \frac{2k}{k-1} \ln c_A \quad (4.31)$$

onde $c_A = c_A/c_{ref}$, é a forma adimensional da variável nível de entropia.

As equações de compatibilidade 4.26, 4.27 e 4.21, podem agora ser escritas em função da variável nível de entropia adimensional da seguinte forma

$$(d\lambda)_\lambda = \frac{c}{c_A} (dc_A)_\lambda - \frac{k-1}{2} \left(\frac{wc}{A} \frac{dA}{dz} - \frac{k-1}{c} (\dot{q} + wF) + F \right) dt \quad (4.32)$$

$$(d\beta)_\beta = \frac{c}{c_A} (dc_A)_\beta - \frac{k-1}{2} \left(\frac{wc}{A} \frac{dA}{dz} - \frac{k-1}{c} (\dot{q} + wF) - F \right) dt \quad (4.33)$$

$$(dc_A)_{path} = \frac{k-1}{2} \frac{c_A}{c^2} (\dot{q} + wF) dt \quad (4.34)$$

Uma outra correlação de interesse, envolvendo a variável nível de entropia, pode ser obtida a partir das Equações 4.28, 4.29 e 4.30. Eliminando ρ e ρ_A destas equações resulta

$$\frac{dp}{p} = \frac{2k}{k-1} \left(\frac{dc}{c} - \frac{dc_A}{c_A} \right)$$

Integrando esta equação entre as condições de referência e as condições locais do fluido, obtém-se

$$p = \left(\frac{c}{c_A} \right)^{\frac{2k}{k-1}} \quad (4.35)$$

onde $p = p/p_{ref}$, é a pressão adimensional.

4.5 A Transferência de Calor às Paredes dos Dutos.

A transferência de calor entre o fluido que se encontra nos dutos de admissão e escape e as paredes desses dutos, ocorre principalmente devido à convecção causada pelo escoamento ora laminar ora turbulento presente nos dutos, e se caracteriza por ser um fenômeno não estacionário. Hoje em dia pode-se encontrar uma série de trabalhos publicados, que descrevem as pesquisas sobre este fenômeno [41, 43, 109, 110]. Na maior parte desses trabalhos, são propostos modelos que permitem avaliar a taxa de transferência de calor instantânea, admitindo-se a hipótese de escoamento quase-estacionário e utilizando-se correlações empíricas para calcular o coeficiente de película. Estas correlações são do tipo

$$Nu = c(Re)^a (Pr)^b$$

onde a , b e c são constantes.

Nas equações que governam o escoamento nos dutos de admissão e escape, a transferência de calor é levada em conta através da taxa de transferência de calor por unidade de massa \dot{q} . Este parâmetro se relaciona com o fluxo de calor ($q'' =$ taxa de transferência de calor por unidade de área) por meio da seguinte expressão

$$\dot{q} = \frac{4}{\rho D_{eq}} q''$$

onde D_{eq} é o diâmetro equivalente do duto, igual a quatro vezes a área da seção transversal, dividida pelo perímetro dessa seção. No caso de dutos circulares, o diâmetro equivalente coincide com o geométrico.

Neste trabalho admite-se a hipótese de escoamento quase-estacionário e completamente turbulento. Esta hipótese permite determinar o coeficiente de película aplicando-se a analogia de Reynolds na forma modificada por Colburn [111], a qual é válida para fluidos com Pr entre 0.6 e 50. A forma modificada da analogia de Reynolds é expressa pela seguinte equação

$$Nu = \frac{f_{atr}}{2} Re (Pr)^{\frac{1}{3}}$$

onde f_{atr} é o coeficiente de atrito. Fazendo $Pr = 0.7$ resulta

$$h = 0.634 f_{atr} C_p w \rho$$

Levando-se em conta que para o caso de escoamento quase-estacionário pode-se escrever

$$q'' = h(T_w - T)$$

e fazendo $C_p = kR/(k - 1)$, obtém-se

$$\dot{q} = 2.537 f_{atr} \frac{k}{k - 1} \frac{R w}{D_{eq}} (T_w - T)$$

4.6 As Condições de Contorno.

As equações de compatibilidade ao longo das curvas características devem ser integradas de forma tal que as condições de contorno sejam satisfeitas. Estas condições relacionam as propriedades do escoamento nas proximidades do extremo com as propriedades do fluido fora do duto.

Nesta seção serão deduzidas as condições de contorno inerentes à configuração de motor considerada no modelo computacional desenvolvido neste trabalho, que são:

1. Escoamento através de válvulas;
2. Escoamento através de extremo aberto; e
3. O caso quando o extremo do duto está fechado.

Na dedução das equações de contorno será admitido que o escoamento nas proximidades dos extremos é quase-estacionário. Além disso, será considerado que a velocidade do fluido nessa região não excede a velocidade do som.

A adoção da primeira destas hipóteses pode ser justificada levando-se em conta que, com as condições de contorno acima enumeradas, o formato do escoamento se altera drasticamente em uma reduzida porção de espaço, o que indica grandes variações das propriedades do fluido em relação à coordenada espacial. Isto permite considerar que a ordem de grandeza das derivadas espaciais é muito maior que a das derivadas em relação ao tempo, e em consequência estas últimas podem ser desprezadas nas equações de balanço, o que equivale a admitir que o escoamento é quase-estacionário.

A segunda hipótese visa dar consistência ao método de solução adotado. Como será visto no Capítulo 5, a determinação das propriedades do escoamento nas regiões próximas aos extremos é feita integrando as equações de compatibilidade sobre as curvas características que propagam as ondas que se aproximam do extremo e logo depois se afastam na direção do interior do duto. Quando a velocidade do fluido é supersônica na seção do extremo, as ondas que se aproximam não são refletidas para o interior do duto e sim para fora dele, o que torna inviável a aplicação deste método de solução. Embora esta hipótese represente uma simplificação do problema, ela se justifica pelo fato que as velocidades supersônicas podem ser atingidas apenas sob determinadas condições

geométricas, as quais geralmente não são satisfeitas nos extremos dos dutos de admissão e escape.

4.6.1 Saída de Gás do Duto Através de uma Válvula.

Esta situação corresponde à direção desejada do escoamento através da válvula de admissão, e ao caso de escoamento reverso através da válvula de escape. O modelo aplicado se estende ao caso de saída de gás do duto através de um bocal redutor [112]. As seções do escoamento consideradas na dedução referem-se à Figura 4.3, onde 1 corresponde à posição em que o fluido ainda ocupa toda a área transversal do duto, entanto que g (garganta) é a seção onde a área transversal do escoamento é mínima. As propriedades do fluido fora do duto são representadas com o subscrito ext .

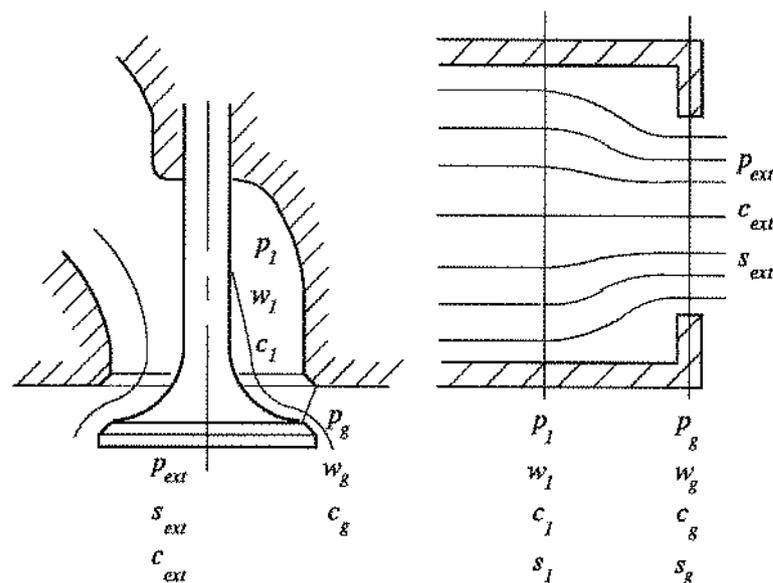


Figura 4.3: Escoamento através de uma válvula ou bocal redutor.

Considera-se que o fluido sofre uma expansão isentrópica a partir das condições na seção 1 até a seção de área mínima g , onde a pressão é considerada igual à pressão externa [112]. Assim para o escoamento entre as seções 1 e g , as equações de balanço de massa e quantidade de movimento (Equações 4.1, 4.3) podem ser escritas na seguinte forma

$$\frac{d(\rho w A)}{dz} = 0 \quad (4.36)$$

$$w \frac{dw}{dz} + \frac{1}{\rho} \frac{dp}{dz} = 0$$

Além disso, da Equação 4.5 e da equação de estado pode-se obter

$$\frac{dp}{dz} - c^2 \frac{d\rho}{dz} = 0$$

Nestas equações, tanto as derivadas em relação ao tempo como os efeitos de atrito e transferência de calor foram desprezados devido às hipóteses de escoamento quase-estacionário e isentrópico.

Tomando o logaritmo da expressão para a velocidade do som $c^2 = kp/\rho$ e derivando em relação a z , obtém-se

$$\frac{2}{c} \frac{dc}{dz} = \frac{1}{p} \frac{dp}{dz} - \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dz}$$

Combinando as três últimas equações e integrando entre a seção 1 e a seção de área mínima g , obtém-se

$$\left(\frac{c_1}{c_g}\right)^2 = \left(\frac{\rho_1}{\rho_g}\right)^{k-1} = \left(\frac{p_1}{p_g}\right)^{\frac{k-1}{k}} \quad (4.37)$$

$$c_1^2 + \frac{k-1}{2} w_1^2 = c_g^2 + \frac{k-1}{2} w_g^2 \quad (4.38)$$

Integrando a Equação 4.36 entre as seções 1 e g , resulta

$$\rho_1 w_1 A_1 = \rho_g w_g A_g$$

ou, levando em conta a Equação 4.37

$$w_g = \frac{1}{\psi} \left(\frac{c_1}{c_g}\right)^{\frac{2}{k-1}} w_1 \quad (4.39)$$

onde ψ é a relação das áreas do escoamento nas seções g e 1, $\psi = A_g/A_1$. Substituindo esta expressão na Equação 4.38 e rearranjando, obtém-se

$$\left(\frac{w_1}{c_1}\right)^2 = \frac{\frac{2}{k-1} \left(1 - \left(\frac{c_g}{c_1}\right)^2\right)}{\frac{1}{\psi^2} \left(\frac{c_1}{c_g}\right)^{\frac{4}{k-1}} - 1} \quad (4.40)$$

Utilizando agora a Equação 4.37 e lembrando que a pressão na seção de garganta é admitida igual à pressão externa, obtém-se

$$\left(\frac{w_1}{c_1}\right)^2 = \frac{\frac{2}{k-1} \left(1 - \left(\frac{p_{ext}}{p_1}\right)^{\frac{k-1}{k}}\right)}{\frac{1}{\psi^2} \left(\frac{p_1}{p_{ext}}\right)^{\frac{2}{k}} - 1}$$

Escrevendo esta equação em termos dos parâmetros adimensionais e levando em conta a Equação 4.35, resulta a seguinte relação para as propriedades do escoamento na seção 1 em função das propriedades do fluido fora do duto

$$\left(\frac{w_1}{c_1}\right)^2 = \frac{\frac{2}{k-1} \left(1 - \left(\frac{C_{A1}}{C_{A_{ext}}} \frac{C_{ext}}{C_1}\right)^2\right)}{\frac{1}{\psi^2} \left(\frac{C_{A_{ext}}}{C_{A1}} \frac{C_1}{C_{ext}}\right)^{\frac{4}{k-1}} - 1} \quad (4.41)$$

Quando esta equação leva ao resultado que o escoamento na seção de garganta é supersônico, aplica-se a condição de escoamento sônico nessa seção $c_g = w_g$. Neste caso, a Equação 4.39 pode ser escrita assim

$$c_g = \frac{1}{\psi} \left(\frac{c_1}{c_g} \right)^{\frac{2}{k-1}} w_1$$

Dividindo ambos lados por c_1 , e rearranjando, obtém-se

$$\frac{w_1}{c_1} = \psi \left(\frac{c_g}{c_1} \right)^{\frac{k+1}{k-1}}$$

Substituindo esta expressão na Equação 4.40 e explicitando ψ , resulta

$$\psi^2 = \left(\frac{k+1}{k-1} - \frac{2}{k-1} \left(\frac{c_1}{c_g} \right)^2 \right) \left(\frac{c_1}{c_g} \right)^{\frac{4}{k-1}}$$

Agora, pelas Equações 4.37 e 4.35, obtém-se a seguinte equação que permite calcular a relação c_1/c_{ext} para o caso de escoamento sônico

$$\psi^2 = \left(\frac{k+1}{k-1} - \frac{2}{k-1} \left(\frac{c_1}{c_{ext}} \frac{c_{A ext}}{c_{A1}} \right)^2 \right) \left(\frac{c_1}{c_{ext}} \frac{c_{A ext}}{c_{A1}} \right)^{\frac{4}{k-1}} \quad (4.42)$$

4.6.2 Entrada de Gás ao Duto Através de uma Válvula.

Esta situação corresponde à direção desejada do escoamento através da válvula de escape e ao caso de escoamento reverso através da válvula de admissão. Benson [87] mostrou que o *modelo de pressão constante* proposto por Jenny [89] é o mais apropriado para este tipo de condição de contorno. Neste modelo é admitido que o gás sofre uma expansão isentrópica a partir das condições externas até atingir a seção de área mínima (seção g no lado esquerdo da Figura 4.3). A partir dessa seção, quando a velocidade do fluido é subsônica, o escoamento ocorre de forma adiabática e mantendo a pressão constante até a seção 1. No caso de velocidade sônica na seção de garganta, o fluido escoava entre g e 1 com queda de pressão.

Levando em conta que o escoamento até a seção g é isentrópico e depois é adiabático, pode-se deduzir da mesma forma como foi feito para o caso de saída de gás do duto, as seguintes equações

$$\left(\frac{c_{ext}}{c_g} \right)^2 = \left(\frac{\rho_{ext}}{\rho_g} \right)^{k-1} = \left(\frac{p_{ext}}{p_g} \right)^{\frac{k-1}{k}} \quad (4.43)$$

$$c_{ext}^2 = c_g^2 + \frac{k-1}{2} w_g^2 = c_1^2 + \frac{k-1}{2} w_1^2 \quad (4.44)$$

Integrando a Equação 4.36 entre as seções g e 1, obtém-se

$$w_g = \frac{1}{\psi} \frac{\rho_1}{\rho_g} w_1$$

Multiplicando e dividindo por ρ_{ext} o lado direito desta equação, e levando em conta a Equação 4.43, resulta

$$w_g = \frac{1}{\psi} \frac{\rho_1}{\rho_{ext}} \left(\frac{p_{ext}}{p_g} \right)^{\frac{1}{k}} w_1$$

Levando em conta que $\rho_1 = k p_1 / c_1^2$ e $\rho_{ext} = k p_{ext} / c_{ext}^2$, obtém-se

$$w_g = \frac{1}{\psi} \frac{p_1}{p_{ext}} \left(\frac{c_{ext}}{c_1} \right)^2 \left(\frac{p_{ext}}{p_g} \right)^{\frac{1}{k}} w_1 \quad (4.45)$$

Substituindo esta expressão na Equação 4.44 e rearranjando, resulta

$$\left(\frac{w_1}{c_1} \right)^2 = \frac{\frac{2}{k-1} \left(1 - \left(\frac{c_g}{c_{ext}} \right)^2 \right)}{\frac{1}{\psi^2} \left(\frac{p_1}{p_{ext}} \right)^2 \left(\frac{c_{ext}}{c_1} \right)^2 \left(\frac{p_{ext}}{p_g} \right)^{\frac{2}{k}}}$$

Utilizando a Equação 4.43 e levando em conta que a pressão se mantém constante entre as seções g e 1 ($p_g = p_1$), resulta

$$\left(\frac{w_1}{c_{ext}} \right)^2 = \psi^2 \frac{2}{k-1} \left(\frac{c_1}{c_{ext}} \right)^4 \left(\frac{p_{ext}}{p_1} \right)^{\frac{k-1}{k}} \left[\left(\frac{p_{ext}}{p_1} \right)^{\frac{k-1}{k}} - 1 \right]$$

Substituindo agora c_1/c_{ext} a partir da Equação 4.44, obtém-se

$$\mathcal{K} = \psi^2 \left(\frac{p_{ext}}{p_1} \right)^{\frac{k-1}{k}} \left[\left(\frac{p_{ext}}{p_1} \right)^{\frac{k-1}{k}} - 1 \right]$$

onde

$$\mathcal{K} = \frac{\frac{k-1}{2} \left(\frac{w_1}{c_{ext}} \right)^2}{\left[1 - \frac{k-1}{2} \left(\frac{w_1}{c_{ext}} \right)^2 \right]^2} \quad (4.46)$$

Resolvendo esta equação quadrática em $\left(\frac{p_1}{p_{ext}} \right)^{\frac{k-1}{k}}$, resulta

$$\left(\frac{p_1}{p_{ext}} \right)^{\frac{k-1}{k}} = \frac{1}{2\mathcal{K}} \left(\psi \sqrt{\psi^2 + 4\mathcal{K}} - \psi^2 \right) \quad (4.47)$$

Quando a hipótese de igualdade de pressões na seção de garganta e na seção 1 leva ao resultado que o escoamento não é subsônico em g , impõe-se a condição de escoamento sônico $w_g = c_g$. Nesse caso, da Equação 4.44 resulta

$$\left(\frac{c_{ext}}{c_g} \right)^2 = \frac{k+1}{2}$$

A Equação 4.43 pode então ser escrita assim

$$\left(\frac{c_{ext}}{c_g} \right)^2 = \left(\frac{\rho_{ext}}{\rho_g} \right)^{k-1} = \left(\frac{p_{ext}}{p_g} \right)^{\frac{k-1}{k}} = \frac{k+1}{2} \quad (4.48)$$

Dividindo ambos lados da Equação 4.45 por c_{ext} , e substituindo w_g por c_g , resulta

$$\frac{c_g}{c_{ext}} = \frac{1}{\psi} \frac{p_1}{p_{ext}} \left(\frac{c_{ext}}{c_1} \right)^2 \left(\frac{p_{ext}}{p_g} \right)^{\frac{1}{k}} \frac{w_1}{c_{ext}}$$

Alem disso, da Equação 4.44 obtém-se

$$\left(\frac{c_1}{c_{ext}} \right)^2 = 1 - \frac{k-1}{2} \left(\frac{w_1}{c_{ext}} \right)^2$$

Combinando as três últimas equações resulta

$$\frac{p_1}{p_{ext}} = \psi \frac{1 - \frac{k-1}{2} \left(\frac{w_1}{c_{ext}} \right)^2}{\frac{w_1}{c_{ext}}} \left(\frac{2}{k+1} \right)^{\frac{k+1}{2(k-1)}} \quad (4.49)$$

Durante a transição, quando o escoamento passa de subsônico para sônico na seção de garganta, tanto a condição de igualdade de pressões $p_1 = p_g$ como a de velocidade sônica $w_g = c_g$ são satisfeitas. Neste limite sônico, verifica-se a seguinte equação que resulta de 4.48

$$\frac{p_g}{p_{ext}} = \frac{p_1}{p_{ext}} = \left(\frac{2}{k+1} \right)^{\frac{k}{k-1}}$$

Substituindo esta expressão na Equação 4.49 pode-se obter o valor da velocidade na seção 1 que corresponde ao limite sônico na seção de garganta w_{1cr} . Assim

$$\left(\frac{w_1}{c_{ext}} \right)_{cr} = \frac{\sqrt{1 + \psi^2(k^2 - 1)} - 1}{\psi(k-1)\sqrt{\frac{k+1}{2}}} \quad (4.50)$$

Deve-se levar em conta que a velocidade do fluido na seção 1 não deve exceder a velocidade do som nessa seção. Assim, a partir da Equação 4.44, pode-se obter a seguinte expressão para a máxima velocidade do fluido permitida (w_{1max})

$$w_{1max} = c_{ext} \sqrt{\frac{2}{k+1}} \quad (4.51)$$

4.6.3 Escoamento Através de um Extremo Livre.

A Figura 4.4 ilustra esta condição de contorno, frequentemente encontrada nos extremos onde os dutos se comunicam com a atmosfera.

Saída de Gás do Duto.

As equações que representam esta condição de contorno podem ser obtidas a partir das Equações 4.41 e 4.42 considerando $\psi = 1$. Assim, estas equações

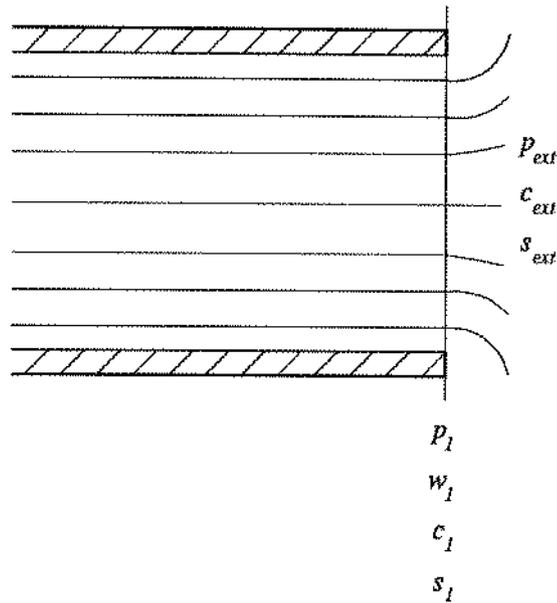


Figura 4.4: Escoamento através de um extremo livre do duto.

resultam respectivamente

$$\left(\frac{w_1}{c_1}\right)^2 = \frac{\frac{2}{k-1} \left(1 - \left(\frac{c_{A1}}{c_{Aext}} \frac{c_{ext}}{c_1}\right)^2\right)}{\left(\frac{c_{Aext}}{c_{A1}} \frac{c_1}{c_{ext}}\right)^{\frac{4}{k-1}} - 1} \quad (4.52)$$

$$1 = \left(\frac{k+1}{k-1} - \frac{2}{k-1} \left(\frac{c_1}{c_{ext}} \frac{c_{Aext}}{c_{A1}}\right)^2\right) \left(\frac{c_1}{c_{ext}} \frac{c_{Aext}}{c_{A1}}\right)^{\frac{4}{k-1}} \quad (4.53)$$

Entrada de Gás no Duto

Neste caso é admitido que o escoamento na entrada do duto é isentrópico. Assim, a Equação 4.44 pode ser aplicada resultando

$$c_1^2 + \frac{k-1}{2} w_1^2 = c_{ext}^2 \quad (4.54)$$

Quando a velocidade do fluido, calculada baseando-se nesta hipótese, resulta ser maior que a velocidade do som, admite-se que o escoamento se encontra no limite sônico, onde além de ser satisfeita a condição dada pela Equação 4.54, a velocidade do fluido se iguala à velocidade do som. Assim, resulta

$$w_1 = c_1 = c_{ext} \sqrt{\frac{2}{k+1}} \quad (4.55)$$

Extremo Fechado do Duto.

Este caso acontece quando as válvulas de admissão e escape se encontram fechadas. Nesta situação a condição imposta é a de velocidade nula no extremo.

Assim,

$$w_1 = 0 \tag{4.56}$$

Capítulo 5

O Algoritmo de Cálculo

5.1 Introdução.

As equações deduzidas nos capítulos anteriores foram utilizadas para se construir dois modelos que permitem simular o funcionamento do motor. O primeiro desses modelos, referido aqui como *modelo de diagnose*, se destina à análise da evolução do processo de combustão de um motor real. Para a utilização deste modelo, é necessário que se disponha do diagrama de pressão no cilindro, medido no motor a ser analisado. O segundo modelo, chamado aqui de *modelo preditivo*, permite prever os parâmetros que caracterizam o desempenho e a eficiência de um motor real ou hipotético. Neste modelo incluem-se os processos de admissão e escape, de forma que as propriedades do fluido de trabalho podem ser determinadas tanto no cilindro como nos dutos de admissão e escape. Para se utilizar o modelo preditivo, é necessário que sejam especificados os parâmetros da função dupla de Wiebe (Capítulo 3), a qual é usada para representar a taxa de queima de combustível. É sabido que os valores destes parâmetros influem marcadamente em todos os resultados da simulação, o que indica que a sua escolha deve ser feita de forma bastante criteriosa e, se possível, baseando-se em dados experimentais de motores similares ou, melhor ainda, baseando-se em dados medidos no mesmo motor operando em condições outras que aquelas sendo analisadas. Este fato reflete o verdadeiro alcance do modelo preditivo — a redução, e não a total supressão, dos trabalhos experimentais.

Nas seções seguintes deste capítulo, descrevem-se os procedimentos utilizados na elaboração destes dois modelos, para solucionar as equações governantes deduzidas nos capítulos anteriores.

5.2 Solução das Equações no Cilindro.

As equações que permitem calcular as propriedades do fluido de trabalho (Equações 3.6 e 3.7 no modelo preditivo e Equações 3.10 e 3.12 no modelo de diagnose) foram integradas usando-se a rotina Runge-Kutta-Gill proposta na referência

[113]. Esta sub-rotina também foi utilizada para se obter os valores integrais das grandezas que fazem parte dos balanços de energia e de exergia. O passo de integração é determinado durante o cálculo dos escoamentos nos dutos de admissão e escape, de acordo com o critério de estabilidade de Courant (descrito mais adiante).

Os modelos incorporam a possibilidade de se optar pelas correlações de transferência de calor de Annand [45] ou de Woschni [46] (Equações 3.14 e 3.15 respectivamente). A utilização da correlação de Woschni no modelo de diagnose implica na necessidade de se fornecer ao modelo, a curva de pressão no cilindro correspondente ao caso quando o motor funciona sem combustão (pressão p_0 na Equação 3.16), obtida experimentalmente. Já no caso do modelo preditivo, este parâmetro é calculado admitindo-se as mesmas hipóteses adotadas na simulação do caso com combustão, e usando-se a correlação de Woschni para quantificar a taxa de transferência de calor. Deve-se ter presente que neste caso, o termo que inclui os efeitos da combustão na correlação de Woschni, resulta identicamente zero. Quando se opta por utilizar a correlação de Annand no modelo preditivo, as equações de Nishiwaki *et alii* [47] são usadas para se determinar a transferência de calor durante os processos de admissão e escape.

5.2.1 As Propriedades do Combustível.

Para o cálculo das propriedades do combustível admite-se a hipótese de líquido incompressível. Assim, considerando-se que no caso de um líquido incompressível, a entalpia depende da temperatura e da pressão, e a entropia é função só da temperatura, pode-se escrever

$$h_f(T, p) = h_f(T_0, p_0) + \int_{T_0}^T c_f(T) dT + \frac{p - p_0}{\rho_f}$$

$$s_f(T) = s_f(T_0) + \int_{T_0}^T \frac{c_f(T)}{T} dT$$

onde

- T_0, p_0 - temperatura e pressão correspondentes aos dados tabelados;
- h_f - entalpia (absoluta) do combustível;
- s_f - entropia (absoluta) do combustível;
- c_f - calor específico do combustível;
- ρ_f - densidade do combustível.

O calor específico c_f é determinado como uma função da temperatura usando-se a seguinte correlação empírica proposta por Gureyev e Kamfer [114], a qual é válida para óleo diesel leve na faixa de 0 a 200 °C.

$$c_f(T) = \frac{1.7}{\sqrt{\rho_{15}}} \left(1 + \frac{T - 273.15}{1000} \right)$$

onde ρ_{15} é a densidade relativa (à água) do combustível, à temperatura igual a

15 °C. Nesta correlação, a temperatura é expressa em Kelvin e o calor específico é obtido em [J/kg-K].

Nos cálculos foram considerados os dados do óleo *Diesel T-T* reportados por Ferguson [4]. Estes dados são sumarizados na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Propriedades do combustível *Diesel T-T*.

Fórmula empírica	$C_{14.4}H_{24.9}$	
Poder calorífico inferior	[MJ/kg]	42.94
Entropia absoluta a 298 K	[kJ/kg-K]	2.66
Densidade	[kg/m ³]	850.0

A entalpia absoluta a 298 K e 1 atm de pressão ($h_f(T_0, p_0)$) foi determinada a partir do poder calorífico inferior, fornecido na tabela acima. O valor calculado foi $h_f(T_0, p_0) = -305.2$ kJ/kg.

A exergia química do combustível foi determinada usando-se a seguinte correlação empírica proposta por Szargut e Styrylska [115], a qual é válida para combustíveis líquidos

$$ex_{ch,f} = PCI \left(1.0401 + 0.1728 \frac{\vartheta_H}{\vartheta_C} + 0.0432 \frac{\vartheta_O}{\vartheta_C} + 0.2169 \frac{\vartheta_S}{\vartheta_C} \left[1 - 2.0628 \frac{\vartheta_H}{\vartheta_C} \right] \right)$$

onde ϑ_i é a fração mássica do elemento i na composição do combustível, e PCI é o poder calorífico inferior do combustível.

5.3 Solução das Equações nos Dutos de Admissão e Escape.

O método de solução das equações características adotado neste trabalho baseia-se no esquema proposto por Benson [87, 92, 93, 108]. Todavia, várias alterações têm sido introduzidas visando obter uma solução mais acurada e mais consistente com a realidade física do problema. Algumas destas modificações foram motivadas pelos trabalhos de Payri *et alii* [116, 117], enquanto que outras têm surgido no próprio processo de otimização do algoritmo. Na exposição que segue, estas modificações serão colocadas em evidência.

5.3.1 A Malha de Cálculo.

Para a integração numérica das equações, a malha de cálculo é construída dividindo-se o comprimento do duto L_d em $n-1$ partes iguais e identificando-se n nós, como mostrado na Figura 5.1. Estes pontos, representados na Figura 5.1 como $(1, \dots, i-1, i, i+1, \dots, n)$, conformam a base da malha na coordenada espacial z . (Note-se que em cada extremo do duto se localiza um nó).

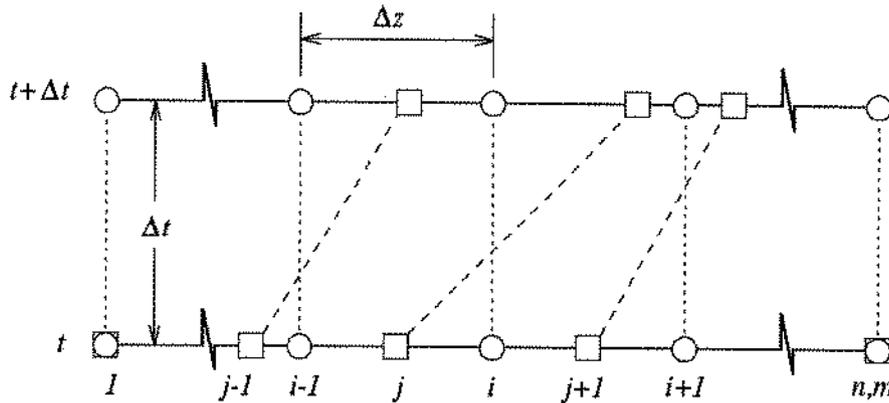


Figura 5.1: A malha de cálculo.

Além dos pontos nodais, devem ser escolhidos m pontos correspondentes às partículas sobre cuja trajetória se fará a integração da Equação 4.34. Estes são os pontos $(1, \dots, j-1, j, j+1, \dots, m)$ na Figura 5.1, os quais daqui em diante passarão a ser chamados de *partículas*. Também neste caso, os extremos do duto devem ser contemplados.

Considera-se que em um determinado instante t são conhecidas a velocidade e as propriedades termodinâmicas do fluido ao longo do duto (inclusive o nível de entropia, que pode ser determinado usando-se a Equação 4.31). Quando $t = 0$, estas condições correspondem aos dados iniciais do problema, os quais, na falta de dados experimentais, podem ser estabelecidos arbitrariamente.

A partir da solução conhecida em (z, t) as equações de compatibilidade 4.32, 4.33 e 4.34 são integradas sobre as correspondentes curvas características, determinando-se a solução em $(z, t + \Delta t)$. O passo no tempo Δt é escolhido de forma tal a satisfazer o critério de estabilidade de Courant, o qual expressa a condição necessária para que o maior deslocamento das ondas de perturbação, não exceda a distância entre nós vizinhos Δz . Assim,

$$\Delta t < \frac{\Delta z}{(|w| + c)_{max}}$$

onde $(|w| + c)$ é a maior velocidade (absoluta) com que podem se propagar as perturbações em um ponto qualquer do duto. Uma vez que os cálculos são feitos simultaneamente para os dutos de admissão e de escape, o passo Δt deve satisfazer o critério de Courant em todos os dutos ao mesmo tempo.

Deve ser ressaltado que o passo espacial na malha de cálculo determina-se *a priori* e é uniforme em cada duto, enquanto que o passo temporal é calculado após cada varredura, sendo que o seu valor muda para cada instante calculado. Desse modo, a malha resulta irregular na direção da coordenada temporal.

5.3.2 As Condições de Referência.

Para trabalhar com as equações na forma adimensional, é preciso definir os parâmetros de referência. Neste modelo, o comprimento de referência z_{ref} é escolhido igual ao passo espacial em cada duto — $\Delta z = L_d/(n-1)$, e o estado de referência é definido de forma diferenciada para os escoamentos de admissão e escape. No caso do escoamento de admissão, as condições de referência são as do ar na saída do compressor (quando se trata de motores turbo-alimentados) ou nas condições atmosféricas (para motores de aspiração natural). Já no caso do escoamento de escape, o estado de referência é definido a partir da relação ar-combustível global do ciclo, a pressão atmosférica e uma temperatura escolhida de forma tal a representar (ao menos aproximadamente) a temperatura média do escoamento. Tipicamente admite-se $T_{ref} = 800-1000$ K. Isto é feito visando diminuir os erros gerados ao admitir que a constante do gás R e a relação de calores específicos k são contantes em cada um destes escoamentos.

5.3.3 O Nível de Entropia no Final do Passo de Integração.

A partir do valor da velocidade das partículas no tempo t , é possível determinar as suas novas posições em $t + \Delta t$, fazendo

$$z_j^{t+\Delta t} = z_j^t + w_j^t \Delta t \quad (5.1)$$

Deve-se levar em conta que o fato de admitir que a velocidade de cada partícula permanece constante durante o passo de integração, gera a possibilidade de interseção de linhas de trajetória, quando as partículas se encontram muito próximas umas das outras. Isto não deve ser permitido no modelo, pois tal situação não tem consistência física. Na realidade, quando duas partículas se aproximam, as suas velocidades tendem a se igualar e então as suas trajetórias resultam paralelas. Para evitar a interseção de linhas de trajetória, o passo de integração deve ser reduzido até que ele seja menor que o valor Δt_{path} mostrado na Figura 5.2. No algoritmo é adotado $\Delta t' = 0.95 \Delta t_{path}$.

O nível de entropia das partículas no tempo $t + \Delta t$ é determinado pela seguinte expressão

$$c_{A_j}^{t+\Delta t} = c_{A_j}^t + \left(\frac{dc_A}{dt} \right)_{path} \Delta t$$

onde a derivada é calculada no ponto (z_j, t) , usando-se a Equação 4.34.

Deve ser notado que quando se tem saída de gás por um dos extremos, o número de partículas dentro do duto diminui. Além disso, as partículas se deslocam na direção da saída concentrando-se na região do duto adjacente ao extremo. Por estes motivos, tem-se adotado um procedimento para manter o espaçamento e o número de partículas (e em consequência, o número de linhas de trajetória), a cada passo de integração. Este procedimento consiste em

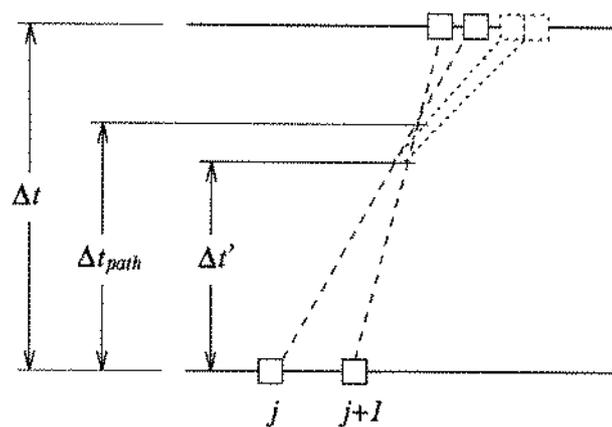


Figura 5.2: Interseção de linhas de trajetória.

restituir as partículas que saem do duto colocando uma delas no extremo onde ocorreu a saída (ponto Q na Figura 5.3), e as outras (caso tenham saído mais de uma) no meio dos maiores “vãos” entre as partículas que ainda estão dentro do duto. A Figura 5.3 mostra a distribuição de partículas, antes e depois da aplicação deste procedimento.

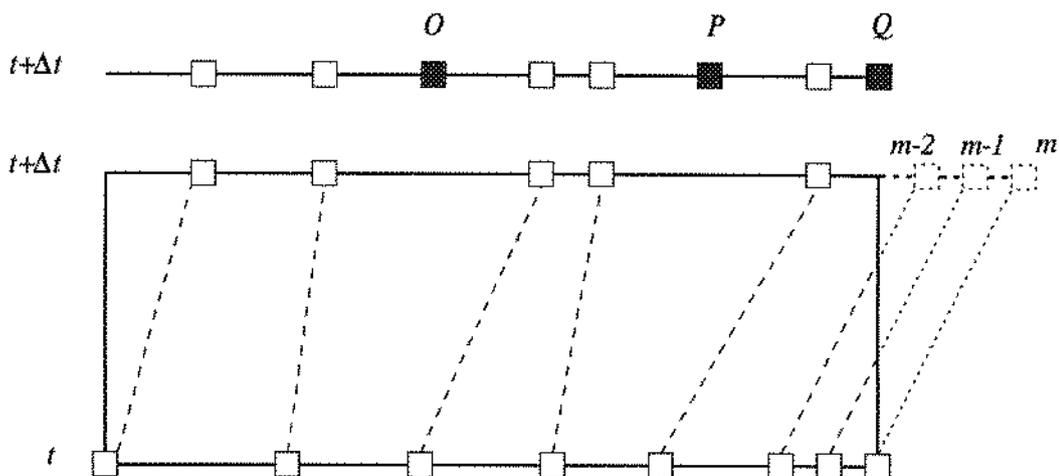


Figura 5.3: Restituição do número de linhas de trajetória.

Nesta figura, $m - 2$, $m - 1$ e m são as partículas que saíram do duto, entanto que O , P e Q são as novas partículas incluídas por meio do procedimento descrito. O nível de entropia destas últimas determina-se por interpolação linear a partir do nível de entropia das partículas vizinhas.

No caso quando se tem entrada de fluido pelo extremo do duto, uma nova linha de trajetória deve ser gerada, incluindo-se uma nova partícula no extremo. Neste caso, admite-se inicialmente que o nível de entropia da nova partícula é igual ao que tinha a partícula que no instante anterior ocupava essa posição. Posteriormente, ao impor as condições de contorno, esse valor deve ser corrigido como será descrito mais adiante.

Para o caso quando a entrada de gás caracteriza mudança no sentido

do escoamento, o esquema proposto por Payri *et alii* [117] tem sido adotado. Este esquema consiste em gerar não apenas uma, mas duas novas linhas de trajetória. Isto deve-se a que a mudança na direção do escoamento pode originar uma abrupta variação do nível de entropia no extremo do duto, se o estado do fluido externo ao duto for muito diferente do estado de aquele que se encontra dentro e nas proximidades do extremo. Esta variação abrupta pode ser reproduzida com bastante precisão se duas novas partículas são introduzidas — uma no extremo do duto e a outra em uma posição muito próxima a essa, como mostra a Figura 5.4. Da mesma forma como no caso anterior, admite-se que o nível de entropia da partícula que se encontra no extremo, é igual ao que tinha a partícula que no instante anterior ocupava essa posição. Já o nível de entropia da segunda partícula, é determinado por interpolação linear. Ao satisfazer a condição de contorno, o nível de entropia da partícula do extremo será corrigido, e então a variação pronunciada na distribuição dessa variável poderá ficar evidente (se for o caso).

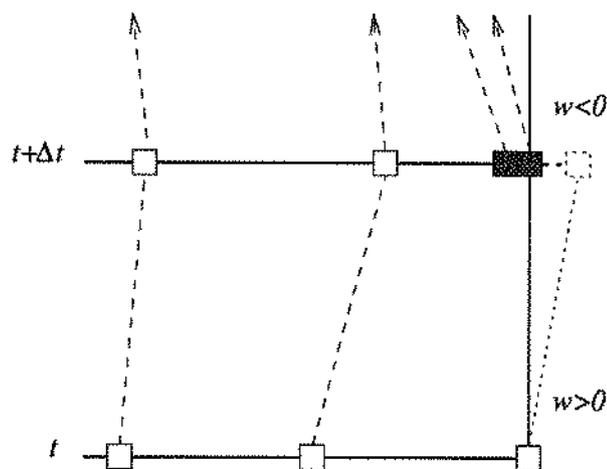


Figura 5.4: Geração de duas linhas de trajetória no caso de mudança na direção do escoamento.

Quando ocorre entrada de gás por um dos extremos, seja caracterizando mudança no sentido de escoamento ou não, o número de linhas de trajetória resulta alterado, já que a inclusão de novas partículas nos extremos não é compensada com a saída de outras. Neste caso, deve-se descartar tantas partículas quantas houver em excesso. O procedimento adotado para escolher as partículas que devem ser descartadas, visa minimizar as alterações causadas na curva de nível de entropia. Este procedimento é ilustrado na Figura 5.5 e consiste em determinar a partícula para a qual é mínima a diferença (em valor absoluto) entre o nível de entropia atual e o nível de entropia que ela teria se este fosse calculado por interpolação linear a partir dos valores correspondentes às partículas vizinhas.

Conhecendo-se as posições das partículas e os seus níveis de entropia no tempo $t + \Delta t$, o valor do nível de entropia nos pontos nodais é determinado por interpolação linear.

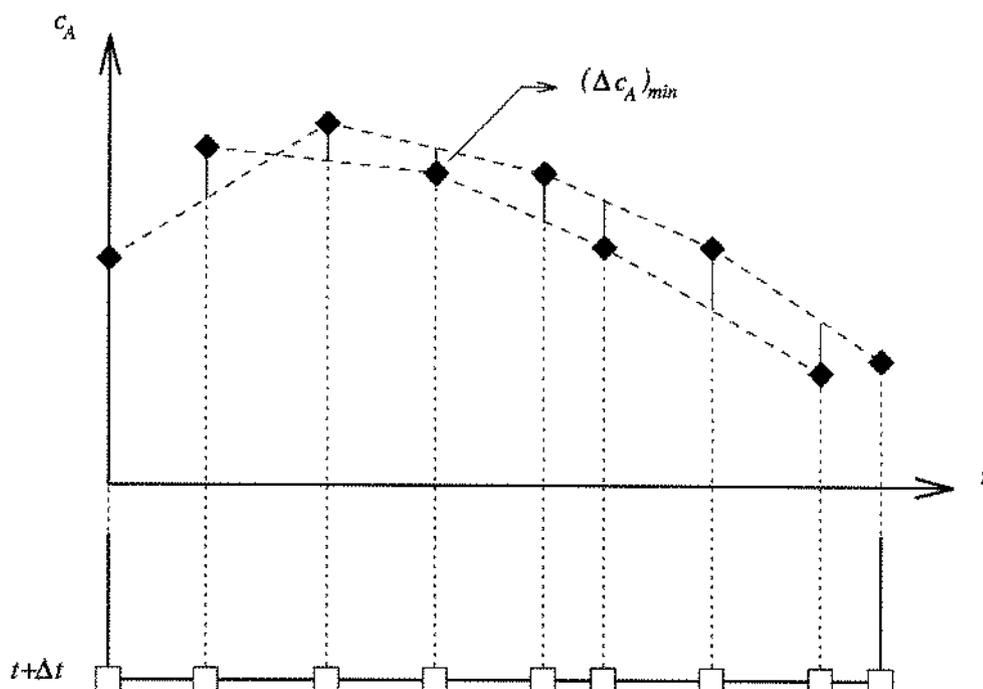


Figura 5.5: Exclusão de uma partícula.

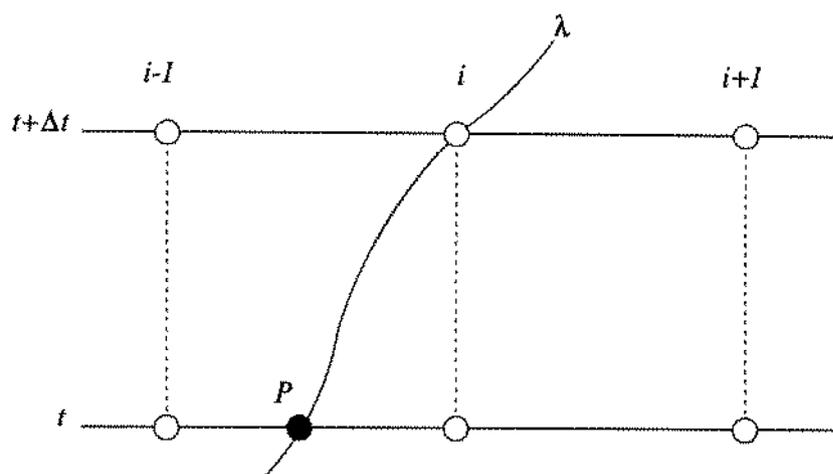
5.3.4 As Variáveis de Riemann no Final do Passo de Integração.

Se a velocidade do fluido e a velocidade de propagação do som são conhecidas para todos os pontos do duto no tempo t , pode-se determinar o valor das variáveis de Riemann λ e β para esse tempo, usando-se as Equações 4.22 e 4.23. A partir destes valores e da distribuição do nível de entropia no tempo $t + \Delta t$, é possível calcular λ e β no final do passo de integração, em todos os nós internos da malha, assim como também o valor de β no extremo da esquerda e o valor de λ no extremo da direita. Uma vez que o problema é igual para λ e para β , só o cálculo de λ será descrito, já que o procedimento utilizado na determinação de β é similar.

O esquema adotado para calcular o valor de λ nos nós internos da malha e no nó do extremo da direita, consiste em achar para cada um deles a posição do ponto P (Figura 5.6), pelo qual passa, no tempo t , a mesma λ -característica que em $t + \Delta t$ passa pelo nó em questão. Em seguida, determina-se o valor das propriedades nesse ponto e então calcula-se o valor de λ na posição $(z_i, t + \Delta t)$, pela seguinte equação

$$\lambda(z_i, t + \Delta t) = \lambda(z_P, t) + \left(\frac{d\lambda}{dt} \right)_\lambda \Delta t$$

onde a derivada é avaliada no ponto (z_P, t) , de acordo com a Equação 4.32.

Figura 5.6: Definição do ponto P .

A derivada $(dc_A/dt)_\lambda$, na Equação 4.32, é calculada pela seguinte expressão

$$\left(\frac{dc_A}{dt}\right)_\lambda = \frac{c_A(z_i, t + \Delta t) - c_A(z_P, t)}{\Delta t}$$

Para encontrar a posição do ponto P , é preciso que seja determinado, inicialmente, o domínio no qual se encontra este ponto. O raciocínio que leva à determinação deste domínio baseia-se na idéia que as λ -características não se interceptam. Embora esta afirmação seja diametralmente oposta ao sustentado por Payri *et alii* [117], ela encontra justificativa no fato que ao resolver o problema de Cauchy para o sistema dado pela Equação 4.10, encontra-se que apenas uma λ -característica passa em cada ponto do domínio. Em consequência, não deve ocorrer a interseção destas curvas. O fato de admitir que a inclinação delas é constante durante o passo de integração, pode eventualmente levar ao resultado errôneo que elas se cruzem, como acontece com as linhas de trajetória. Quando isto ocorre, o passo de integração deve ser reduzido da mesma forma como foi feito para as linhas de trajetória.

Assim, já que não pode ocorrer interseção, uma primeira informação sobre a posição do ponto P pode ser obtida ao se determinar o sentido no qual se direciona a λ -característica que passa pelo ponto (z_i, t) . Isto é feito calculando-se a derivada $(dt/dz)_\lambda$ pela Equação 4.18. Se a característica se direciona para o lado direito $((dt/dz)_\lambda > 0)$, deve-se esperar que o ponto P se encontre à esquerda da posição z_i . Se ao contrário, a derivada $(dt/dz)_\lambda$ resulta negativa, o ponto P deverá estar à direita da posição z_i . Estas duas situações são mostradas na Figura 5.7.

O domínio no qual se encontra o ponto P pode ainda ser delimitado se se leva em conta que ao satisfazer o critério de Courant, se garante que o maior deslocamento de uma perturbação, não irá exceder a distância entre nós vizinhos. Isto equivale a dizer que o ponto P não pode ficar afastado da posição z_i em uma distância maior que Δz . Dessa forma, o ponto deverá se localizar

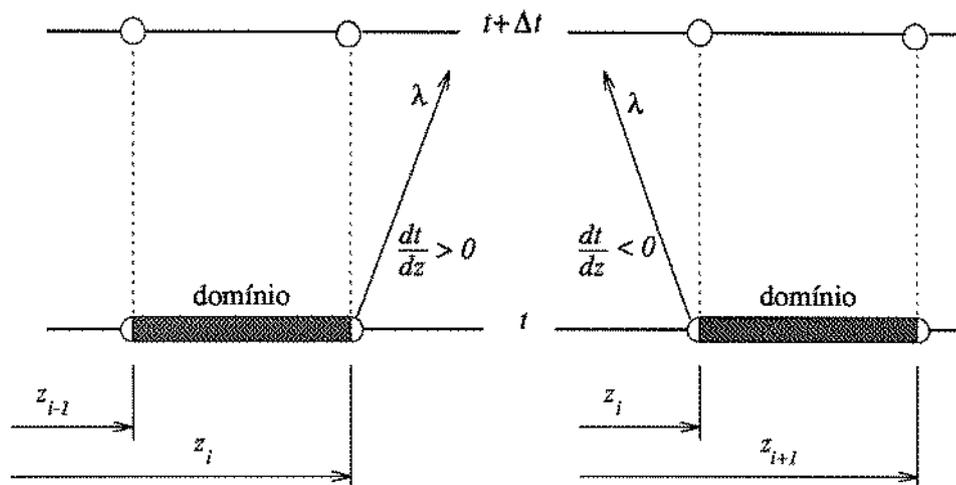


Figura 5.7: Domínio de localização do ponto P .

entre as posições z_{i-1} e z_i quando a derivada $(dt/dz)_\lambda$ no ponto (z_i, t) for positiva, e entre z_i e z_{i+1} quando esta derivada for negativa.

A posição do ponto P pode agora ser determinada pelo procedimento mostrado na Figura 5.8, onde Q é o nó no qual deseja-se determinar o valor de λ , entanto que $I - 1$ e I são os pontos nodais entre os quais se encontra o ponto P .

Prolongando os segmentos de reta que representam as λ -características que passam por $I - 1$ e I , determina-se o ponto de interseção O_0 (o qual não deve se encontrar na faixa entre t e $t + \Delta t$ pelos motivos acima expostos). Unindo os pontos O_0 e Q determina-se P_0 sobre a linha t , o qual corresponde à primeira estimativa da posição do ponto P . Após isto, verifica-se se a λ -característica que passa por P_0 efetivamente chega no ponto Q . Para isto calculam-se as propriedades do escoamento no ponto P_0 por interpolação, e determina-se o ponto Q_0 , onde chega a λ -característica, pela seguinte expressão

$$z_{Q_0} = z_{P_0} + \left(\frac{dz}{dt} \right)_\lambda \Delta t$$

onde a derivada $(dz/dt)_\lambda$ é calculada no ponto P_0 pela Equação 4.18. Se a distância entre os pontos Q_0 e Q for menor que um valor estipulado *a priori* δz , admite-se que o ponto P coincide com P_0 . No modelo adota-se $\delta z = 10^{-6} \cdot \Delta z$. Se este critério de convergência ainda não tiver sido satisfeito (como geralmente ocorre após a primeira iteração), determina-se o lado do qual se encontra o ponto Q_0 em relação ao ponto Q . Se for do lado direito, inicia-se uma nova iteração considerando que o ponto P se encontra entre $I - 1$ e P_0 , se ao contrário o ponto Q_0 estiver do lado esquerdo de Q , como na Figura 5.8, considera-se que o ponto P se encontra entre P_0 e I . O procedimento é repetido até que o critério de convergência seja satisfeito.

Um aspecto importante neste procedimento refere-se ao método adotado para interpolar valores entre nós vizinhos. Benson [87, 92, 93, 108] e Rousseau

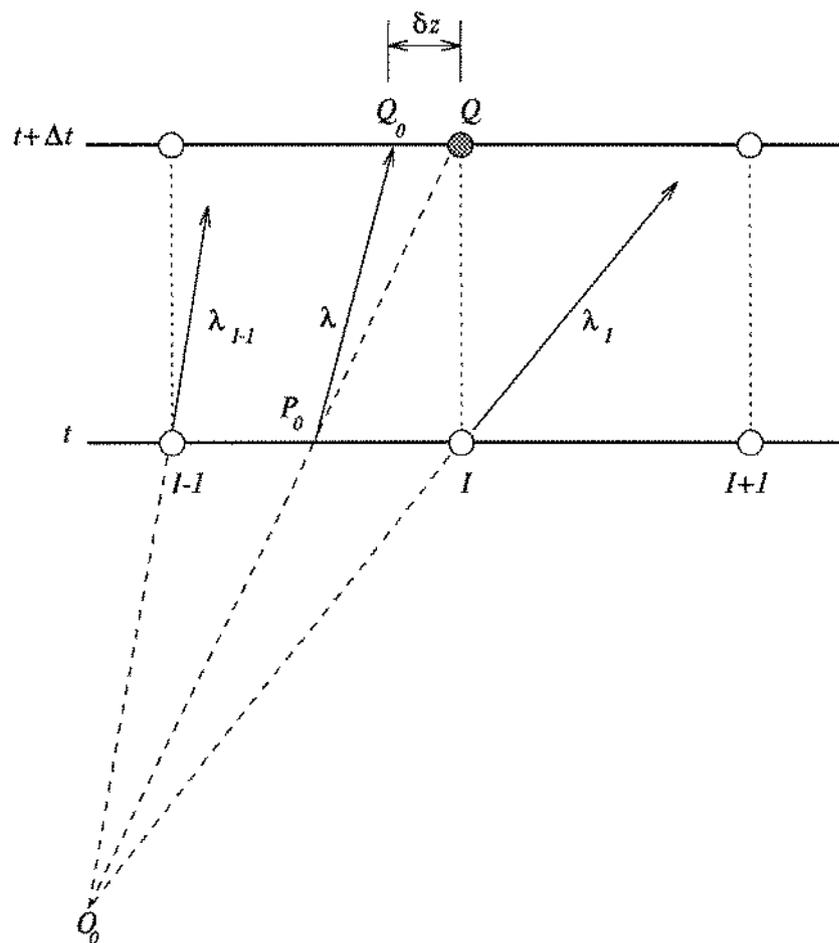


Figura 5.8: Determinação do posição do ponto P .

[90], admitem que λ e β variam linearmente entre esses pontos, o que significa variação linear da velocidade do fluido e da velocidade do som. Já Payri *et alii* [117] propõem que se adote que tanto a vazão volumétrica (wA) como a pressão (p), variam linearmente entre os pontos nodais. Estas hipóteses resultam mais consistentes do que aquelas propostas por Benson pois admitir que a velocidade do fluido varia linearmente, é uma posição conflitante com o fato de que o modelo permite variações da área da seção transversal do duto, já que a velocidade do fluido é fortemente dependente destas variações. De outro lado, como a pressão é uma propriedade que se transmite mais rapidamente do que a temperatura e, em consequência, do que a velocidade do som, é mais correto admitir variação linear da pressão, antes que admitir que a velocidade do som se comporta dessa maneira.

No modelo, o cálculo das variáveis de Riemann em um ponto qualquer do eixo t (por exemplo o ponto Q na Figura 5.9), é feito interpolando o nível de entropia entre as partículas vizinhas ($j - 1$ e j), e interpolando a pressão e a vazão volumétrica entre os nós em torno do ponto (i e $i + 1$). Referindo-se a Figura 5.9, a sequência de cálculo é a seguinte:

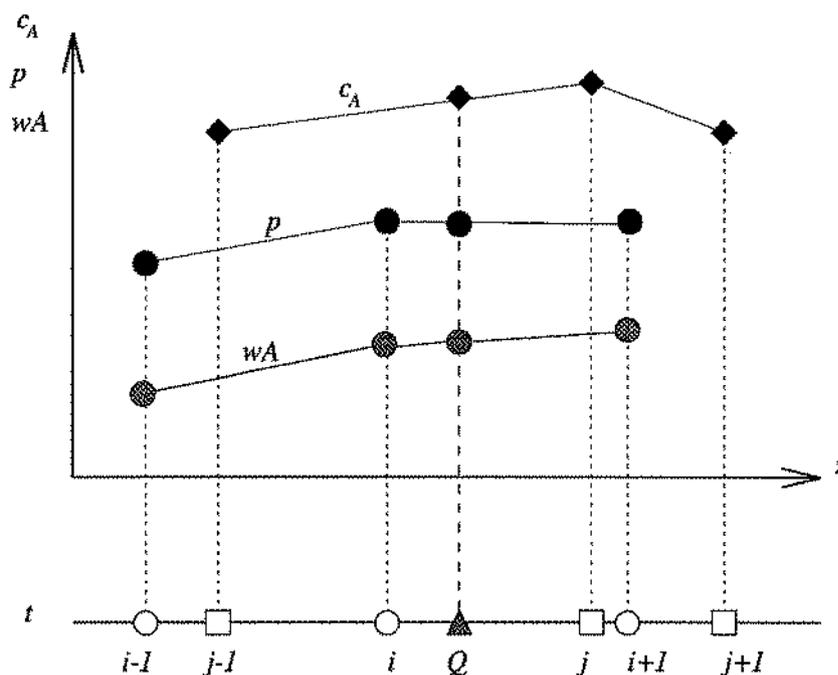


Figura 5.9: Interpolação de valores no modelo.

$$c_{AQ} = c_{Aj-1} + (c_{Aj} - c_{Aj-1}) \frac{z_Q - z_{j-1}}{z_j - z_{j-1}}$$

$$p_Q = p_i + (p_{i+1} - p_i) \frac{z_Q - z_i}{z_{i+1} - z_i}$$

$$(wA)_Q = (wA)_i + ((wA)_{i+1} - (wA)_i) \frac{z_Q - z_i}{z_{i+1} - z_i}$$

$$w_Q = \frac{(wA)_Q}{A_Q}$$

Além disso, das Equações 4.35, 4.22 e 4.23, obtém-se

$$c_Q = c_{AQ} (p_Q)^{\frac{k-1}{2k}}$$

$$\lambda_Q = c_Q + \frac{k-1}{2} w_Q$$

$$\beta_Q = c_Q - \frac{k-1}{2} w_Q$$

5.3.5 Cálculo das Variáveis de Riemann nos Extremos do Duto.

O problema referente ao cálculo da variável λ no extremo esquerdo do duto e da variável β no extremo da direita, pode ser enunciado de forma genérica se se leva em conta que em ambos os casos é conhecido o valor da variável de Riemann que caracteriza a linha de Mach que se “aproxima” do extremo (λ_e), e se requer calcular o valor da variável de Riemann que caracteriza a linha de Mach que se “afasta” do extremo (λ_s). A Figura 5.10 mostra as duas situações. Repare-se que no caso do extremo da esquerda, a característica que se aproxima é uma β -característica e a variável de Riemann conhecida é β . Já no caso do extremo da direita, se aproxima uma λ -característica e se conhece o valor de λ .

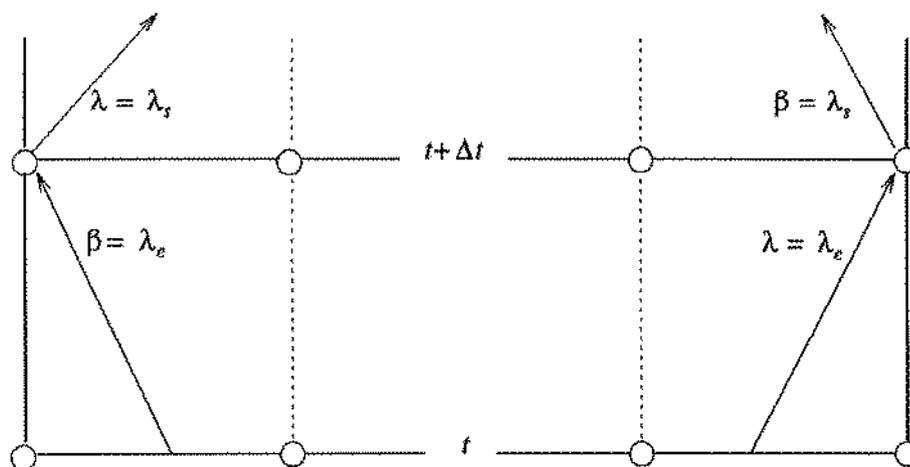


Figura 5.10: Curvas características nos extremos do duto.

Além disso, pode-se definir uma coordenada espacial z' nas proximidades do extremo, de forma que a velocidade do fluido em relação a esse eixo (\bar{w}), seja positiva quando se direciona no sentido da saída do duto. É evidente que quando se trata do extremo da direita, o eixo z' coincide com z , entanto

que no extremo da esquerda estes eixos apontam em direções opostas. Assim, no extremo da direita tem-se

$$\bar{w} = w = \frac{\lambda - \beta}{k - 1} = \frac{\lambda_e - \lambda_s}{k - 1}$$

enquanto que no extremo da esquerda,

$$\bar{w} = -w = \frac{\beta - \lambda}{k - 1} = \frac{\lambda_e - \lambda_s}{k - 1}$$

Note-se que a velocidade do fluido \bar{w} expressa em termos de λ_e e λ_s , é igual para os extremos da direita e da esquerda. Assim, em ambos extremos verifica-se

$$\bar{w} = \frac{\lambda_e - \lambda_s}{k - 1} \quad (5.2)$$

$$c = \frac{\lambda_e + \lambda_s}{2} \quad (5.3)$$

Feitas estas considerações, o problema a resolver consiste em calcular λ_s , levando em conta os tipos de condições de contorno analisados na Seção 4.6.

Determinação da Direção do Escoamento no Extremo.

Para o cálculo das variáveis de Riemann nos extremos do duto, é necessário que a direção do escoamento nesses pontos seja determinada. A partir desta informação e conhecendo-se o tipo de contorno, pode-se efetuar o cálculo pelas equações deduzidas na Seção 4.6.

Na determinação da direção do escoamento, deve-se levar em conta que para que a velocidade do fluido passe de positiva a negativa ou vice-versa, ela necessariamente tem que ser nula num determinado instante. Além disso, se se considera que a distância que separa o ponto de fronteira da seção externa do duto é muito pequena, pode-se admitir que no instante quando a velocidade é nula, a pressão no extremo é igual à pressão externa. Assim, no limite quando o escoamento muda de sentido, se verificam as seguintes equações

$$\bar{w} = 0$$

$$p = p_{ext}$$

A partir destas expressões e levando-se em conta as Equações 4.35, 5.2 e 5.3, obtém-se que no limite

$$\frac{\lambda_e}{c_A} p^{-\frac{k-1}{2k}} = 1$$

Fazendo uma análise perturbativa, pode-se mostrar que as condições necessárias para que ocorra saída e entrada de gás ao duto, são respectivamente

$$\frac{\lambda_e}{c_A} p^{-\frac{k-1}{2k}} > 1$$

$$\frac{\lambda_e}{c_A} p^{-\frac{k-1}{2k}} < 1$$

Saída de Gás do Duto Através de uma Válvula.

Neste caso, admite-se inicialmente que o escoamento na seção de garganta é subsônico, e se aplica a condição de contorno dada pela Equação 4.41. Esta equação pode ser escrita de uma forma mais conveniente definindo-se as seguintes variáveis

$$\begin{aligned} w^* &= \frac{\bar{w}_1}{c_{ext}} \frac{c_{A ext}}{c_{A1}} \\ c^* &= \frac{c_1}{c_{ext}} \frac{c_{A ext}}{c_{A1}} \\ \lambda_e^* &= \frac{\lambda_e}{c_{ext}} \frac{c_{A ext}}{c_{A1}} \\ \lambda_s^* &= \frac{\lambda_s}{c_{ext}} \frac{c_{A ext}}{c_{A1}} \end{aligned}$$

Assim, a Equação 4.41 resulta

$$w^{*2} = \frac{\frac{2}{k-1} \psi^2 (c^{*2} - 1)}{c^{*\frac{4}{k-1}} - \psi^2}$$

Além disso, a partir das Equações 4.24 e 4.25 obtém-se

$$w^* = \frac{2}{k-1} (\lambda_e^* - c^*) \quad (5.4)$$

Das duas últimas equações resulta

$$f(c^*) = (\lambda_e^* - c^*)^2 (c^{*\frac{4}{k-1}} - \psi^2) - \frac{k-1}{2} \psi^2 (c^{*2} - 1) = 0$$

Esta equação transcendental é resolvida no modelo pelo método de bissecção.

Feito o cálculo de c^* pela equação acima, verifica-se se a condição de escoamento subsônico na seção de garganta é satisfeita. Para isto, uma expressão para o número de Mach nessa seção é deduzida multiplicando e dividindo o lado direito da Equação 4.39 por c_g e c_1 . Assim

$$w_g = \frac{1}{\psi} \left(\frac{c_1}{c_g} \right)^{\frac{2}{k-1}} w_1 \frac{c_g}{c_g} \frac{c_1}{c_1}$$

Levando em conta as Equações 4.37 e 4.35, resulta

$$M_g = \frac{1}{\psi} w^* c^{*\frac{2}{k-1}}$$

onde $M_g = w_g/c_g$, é o número de Mach na seção de garganta. Se M_g for maior que 1, deve-se impor a condição de escoamento crítico dada pela Equação 4.42, a qual pode ser escrita na seguinte forma

$$f(c^*) = \psi^2 - \left(\frac{k+1}{k-1} - \frac{2}{k-1} c^{*2} \right) c^{*\frac{4}{k-1}} = 0$$

Esta equação é resolvida pelo método de bissecção.

Assim, uma vez feito o cálculo de c^* pode-se determinar w^* pela Equação 5.4, e então calcular λ_s^* e λ_g .

A saída de gás do duto através de um extremo livre é considerada um caso particular deste, quando $\psi = 1$.

Entrada de Gás ao Duto Através de uma Válvula.

Quando o gás entra por um dos extremos do duto, o valor do nível de entropia na fronteira deve ser corrigido para satisfazer as condições de contorno. Como a variável de Riemann λ_e é calculada a partir do valor do nível de entropia no extremo, ela também deve ser corrigida de acordo com o novo valor deste. A partir da Equação 4.32 pode-se obter a seguinte expressão para a variação de λ_e devido a pequenas alterações do nível de entropia.

$$\Delta\lambda_e = \frac{c}{c_A} \Delta c_A$$

Fazendo

$$\begin{aligned} \Delta\lambda_e &= \lambda_e - \lambda_{en} \\ \Delta c_A &= c_A - c_{An} \end{aligned}$$

onde o subscrito n se refere aos valores não corrigidos, obtém-se

$$\lambda_e = \lambda_{en} + c \left(1 - \frac{c_{An}}{c_A} \right) \quad (5.5)$$

Combinando esta expressão com as Equações 5.2, 5.3 e 4.35, e levando em conta que $\bar{w} < 0$, resulta

$$p^{\frac{k-1}{2k}} = \frac{\lambda_{en} + \frac{k-1}{2} |w|}{c_{An}}$$

Esta equação pode ser escrita na seguinte forma

$$f(|w|) = c_{An} p^{\frac{k-1}{2k}} - \lambda_{en} - \frac{k-1}{2} |w| = 0 \quad (5.6)$$

onde, de acordo com as Equações 4.47 e 4.49

$$p^{\frac{k-1}{2k}} = \begin{cases} p_{ext}^{\frac{k-1}{2k}} \left[\frac{1}{2\mathcal{K}} \left(\psi \sqrt{\psi^2 + 4\mathcal{K}} - \psi^2 \right) \right]^{\frac{1}{2}} & 0 \leq |w| \leq w_{cr} \\ p_{ext}^{\frac{k-1}{2k}} \left[\psi \frac{1 - \frac{k-1}{2} \left(\frac{|w|}{c_{ext}} \right)^2}{\frac{|w|}{c_{ext}}} \left(\frac{2}{k+1} \right)^{\frac{k+1}{2(k-1)}} \right]^{\frac{k-1}{2k}} & w_{cr} < |w| \leq w_{max} \end{cases}$$

Nesta equação \mathcal{K} , w_{cr} e w_{max} são determinados pelas Equações 4.46, 4.50 e 4.51 respectivamente. No programa, a Equação 5.6 é resolvida pelo método de bissecção.

Entrada de Gás ao Duto Através de um Extremo Livre.

Como no caso anterior o valor de λ_e deve ser corrigido pela Equação 5.5, a qual, combinada com as Equações 5.2 e 5.3, e levando em conta que neste caso $\bar{w} < 0$, resulta

$$\frac{c_{An}}{c_A} c = \frac{k-1}{2} |w| + \lambda_{e,n}$$

Como o escoamento é considerado isentrópico, pode-se escrever $c_A = c_{A\,ext}$. Além disso, no caso de velocidade subsônica na seção 1, a Equação 4.54 deve ser satisfeita. Assim, combinando esta equação com a expressão acima e elevando ao quadrado, obtém-se

$$\left[\frac{k-1}{2} + \left(\frac{c_{An}}{c_{A\,ext}} \right)^2 \right] |w|^2 + 2\lambda_{e,n}|w| - \frac{2}{k-1} \left[\left(\frac{c_{An}}{c_{A\,ext}} \right)^2 c_{ext} - \lambda_{e,n}^2 \right] = 0$$

A solução positiva desta equação quadrática proporciona o módulo da velocidade do fluido na seção 1. Em seguida, as Equações 4.54 e 4.35 devem ser utilizadas para calcular c e p .

Se resulta que $|w| > c$, a condição dada pela Equação 4.55 deve ser imposta.

Extremo Fechado do Duto.

Neste caso a condição de contorno imposta se expressa pela Equação 4.56, de onde resulta

$$\lambda_s = \lambda_e$$

Capítulo 6

Alguns Cálculos e Resultados

6.1 Resultados Obtidos com o Modelo de Diagnose.

Nesta seção são mostrados os resultados que foram obtidos aplicando-se o modelo de diagnose para analisar o processo de combustão de um motor diesel monocilíndrico de injeção direta, ensaiado em bancada. Os dados experimentais foram levantados no Laboratório de Pesquisas de Motores do Instituto de Automóveis e Rodovias de Moscou. O motor foi equipado com um dos cabeçotes individuais do motor de linha KAMAZ, e as condições de turboalimentação correspondentes a esse motor de linha foram simuladas com ajuda de um compressor colocado na entrada do sistema de admissão. A pressão de alimentação foi regulada de forma tal a reproduzir as condições verificadas no motor original a cada ensaio realizado. A resistência hidráulica gerada pela turbina também foi simulada através de um estrangulamento do escoamento de exaustão, praticado na saída dos gases. O motor foi ensaiado a diferentes condições de operação, mantendo-se em cada caso o ângulo ótimo de avanço da injeção. Os diagramas de pressão no cilindro foram obtidos com o auxílio de um transdutor de pressão pneumático tipo MAI-2 instalado no cabeçote do motor, e um sistema de registro gráfico unido ao eixo do motor através de um acoplamento removível similar à embreagem de um automóvel (acoplamento friccional). Uma descrição detalhada do transdutor MAI-2 pode ser encontrada na referência [118]. A Tabela 6.1 mostra os dados geométricos do motor, assim como outros dados requeridos pelo modelo de diagnose. As temperaturas das superfícies de transferência de calor que aparecem nesta tabela, foram estimadas baseando-se em dados de motores similares publicados nas referências [11] e [50].

A Figura 6.1 mostra um exemplo do diagrama de pressão emitido pelo sistema de registro gráfico. Juntamente com a curva de pressão que caracteriza o motor funcionando com combustão, em cada ensaio foi determinada a curva de pressão para o caso de acionamento externo do motor. Para se obter esta curva,

Tabela 6.1: Dados do modelo de diagnose.

Dados da geometria do motor			
Taxa de compressão	16		
Comprimento da biela [m]	0.225		
Diâmetro do cilindro [m]	0.120		
Deslocamento do pistão [m]	0.120		
Diâmetro da câmara de combustão [m]	0.066		
Diâmetro da válvula de admissão [m]	0.055		
Diâmetro da válvula de escape [m]	0.049		
Ângulo de manivela do final da admissão	-132		
Ângulo de manivela do início da exaustão	114		
Dados do ar ambiental			
Pressão [bar]	1.0135		
Temperatura [K]	298		
Fração molar de O_2	0.2082		
Fração molar de N_2	0.7760		
Fração molar de CO_2	0.0003		
Fração molar de H_2O	0.0062		
Fração molar de Ar	0.0093		
Dados do combustível			
Fórmula empírica	$C_{14.4}H_{24.9}$		
Entalpia às condições ambientais [kJ/kg]	-305.2		
Entropia às condições ambientais [kJ/kg-K]	2.656		
Entalpia às condições de injeção [kJ/kg]	-179.2		
Entropia às condições de injeção [kJ/kg-K]	2.869		
Poder calorífico inferior [MJ/kg]	42.94		
Ensaio	1	2	3
Dados operacionais			
Frequência de rotação [rpm]	1200	1800	2400
Pressão no final da admissão [bar]	1.2	1.64	1.92
Temperatura no final da admissão [K]	316	330	344
Relação de equivalência no final da admissão	0.015	0.014	0.013
Consumo de combustível [kg/h]	2.80	4.82	5.83
Consumo de ar [kg/h]	62.93	124.13	184.37
Ângulo de manivela do início da injeção	-14	-18	-20
Temperatura das paredes [K]			
Cabeçote	485	513	533
Pistão	563	589	620
Cilindro	542	566	588
Válvula de admissão	555	637	687
Válvula de escape	806	908	981

o fornecimento de combustível ao sistema de injeção era cortado imediatamente após ter sido medida a pressão para o caso com combustão, e o dinamômetro (de corrente contínua) passava a funcionar em regime de motor, mantendo a frequência de rotação que corresponde ao ensaio. A curva de pressão do motor acionado externamente é utilizada para determinar a posição do ponto morto superior no diagrama. A metodologia adotada neste trabalho é aquela habitualmente utilizada no Instituto acima mencionado, e consiste em admitir que o ponto morto superior se encontra deslocado 0.5 grau em relação ao eixo de simetria da curva de pressão sem combustão. O sentido de deslocamento corresponde à produção de trabalho negativo verificada no caso de acionamento externo.

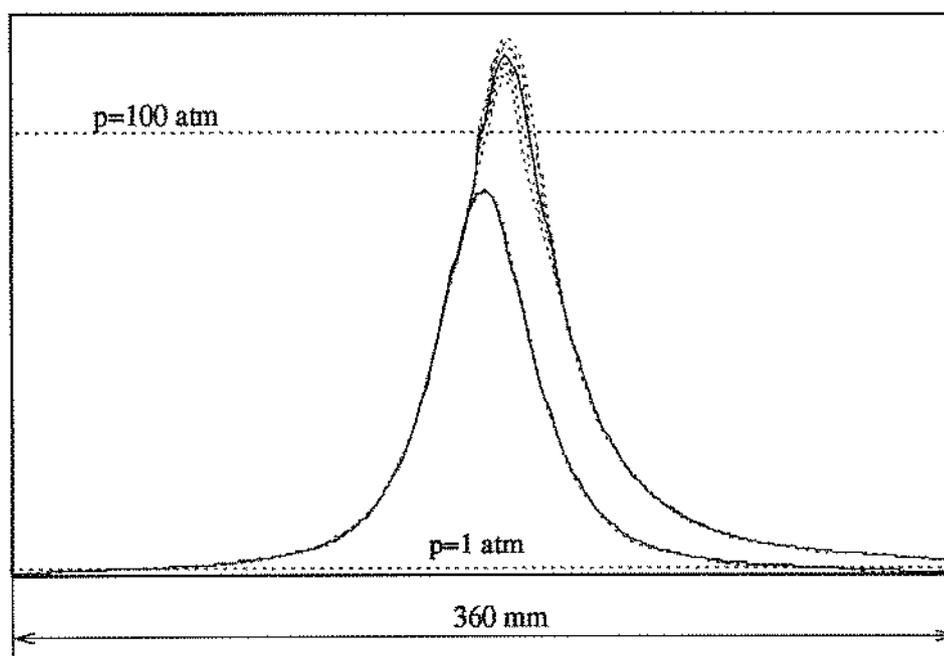


Figura 6.1: Diagrama de pressão obtido experimentalmente.

Na Figura 6.1 pode-se observar que na região do pico de pressão os dados são bastante dispersos, o que evidencia a irrepitibilidade dos ciclos individuais. Para se obter uma curva representativa da pressão no cilindro, foi traçada uma linha que passa no meio do campo ocupado pelos pontos registrados. Essa curva, mostrada na Figura 6.1 com traço contínuo, é considerada equivalente à pressão média de vários ciclos, para as condições de operação do ensaio. Note-se que o critério para se traçar esta linha “média” é puramente visual e, portanto, a derivada desta curva está sujeita a apresentar um formato bastante irregular. Neste trabalho, este problema foi contornado admitindo-se que a curva da pressão “média” pode ser representada adequadamente por expressões polinomiais, e determinando-se os coeficientes dos polinômios por meio do método de quadrados mínimos. As Figuras 6.2 e 6.3 mostram as curvas de pressão e da derivada da pressão antes e depois de serem ajustadas. Na Figura 6.4 são mostradas as curvas de pressão já ajustadas, para os três casos que serão analisados.

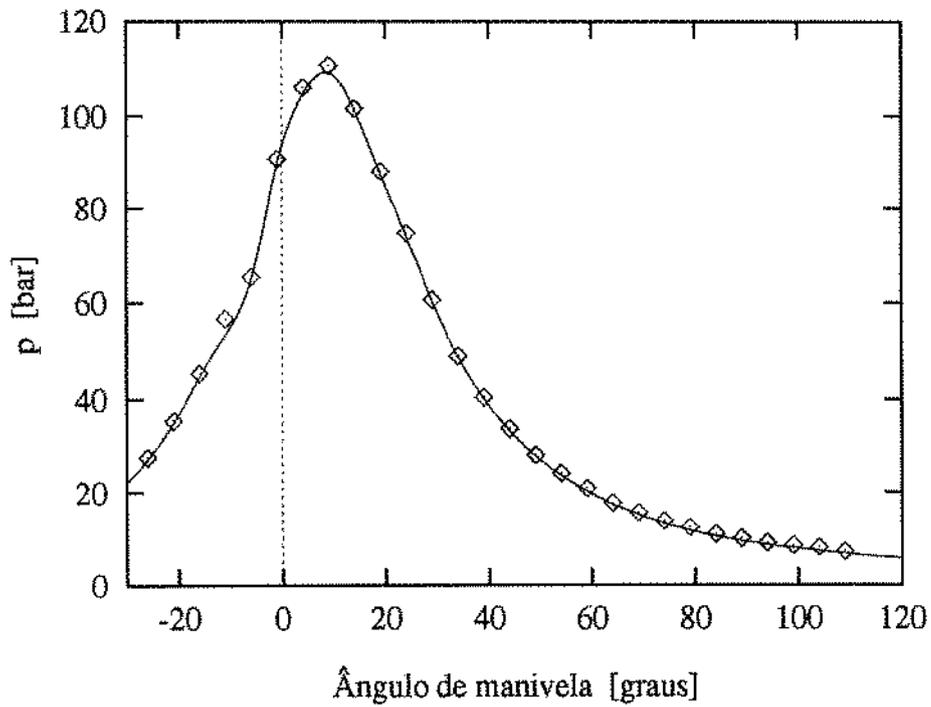


Figura 6.2: Ajuste da curva de pressão usando-se polinômios.

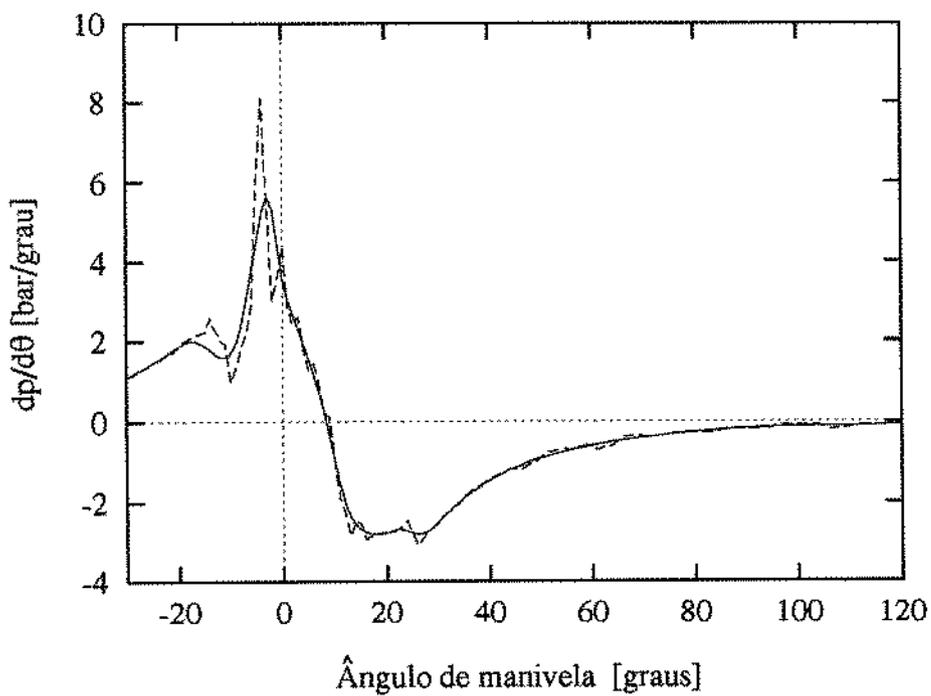


Figura 6.3: Ajuste da derivada da pressão usando-se polinômios.

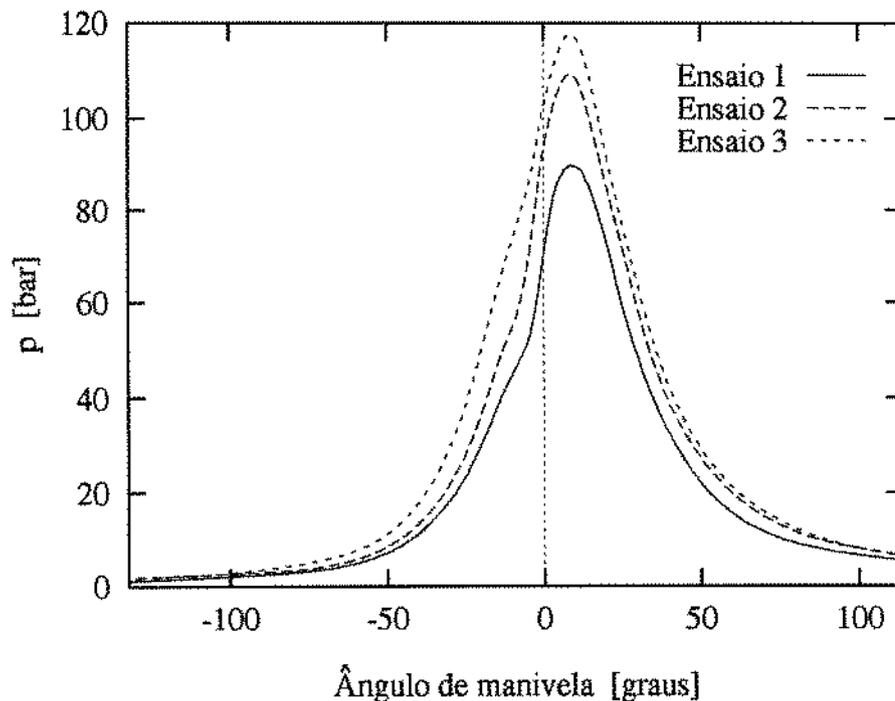


Figura 6.4: As curvas de pressão ajustadas.

Como já foi mencionado no Capítulo 3, a análise do processo de combustão se baseia no cálculo da *taxa aparente de liberação da energia contida no combustível*, a qual pode ser expressa em termos da massa de combustível cujo conteúdo energético é equivalente à energia liberada. Nesse caso fala-se de *taxa aparente de queima de combustível*. Este parâmetro é mostrado na Figura 6.5 para o caso do *Ensaio 2*. É de se esperar que antes do início da combustão, a taxa de queima de combustível seja nula. No entanto, na Figura 6.5 observa-se que este parâmetro apenas oscila em torno de zero. Esta incoerência deve ser atribuída, principalmente, aos erros induzidos pela forma como foi obtida a curva média de pressão, e também ao fato de se admitir que esta curva segue um formato polinomial. Além disso, os erros de medição da pressão, as imprecisões do modelo adotado para se quantificar a transferência de calor e a presença de fugas de gases do cilindro, devem também ser levados em conta para se explicar este fato. Quando se inicia a injeção de combustível (-18 graus do ângulo de manivela), observa-se que a curva da taxa de queima de combustível se torna negativa por um curto período de tempo e logo depois cresce de forma pronunciada mostrando que a combustão já começou. Os valores negativos que antecedem à ignição podem ser mais facilmente explicados referindo-se à taxa de liberação de energia antes que à taxa de queima de combustível. Estes valores decorrem da evaporação do combustível injetado durante o período de atraso da ignição e também da presença de reações endotérmicas que antecedem o surgimento dos focos de combustão [42]. Estes fenômenos levam a uma diminuição da temperatura dos gases no cilindro, o que é computado como uma

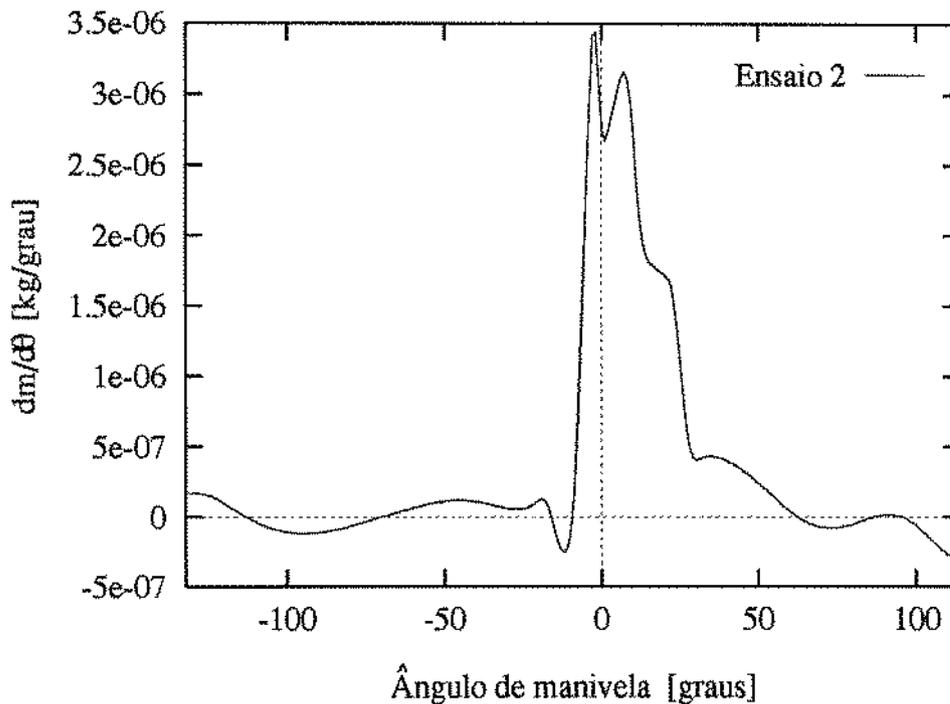


Figura 6.5: A taxa de queima de combustível — Ensaio 2.

extração da energia do sistema (liberação negativa de energia). No intervalo em que ocorre o processo de combustão (entre -9 e 62 graus do ângulo de manivela), podem ser claramente distinguidas as fases pré-misturada e difusiva da combustão. A primeira destas fases corresponde ao primeiro máximo da curva e dura (neste caso) até o instante que o pistão atinge o ponto morto superior. A partir desse momento se inicia a fase difusiva, na qual ocorre a maior parte da combustão. As oscilações em torno do valor zero e os valores negativos observados após o final da combustão, devem ser atribuídos aos mesmos motivos que causam essas incoerências durante o processo de compressão. Obviamente estas fontes de erros também perturbam a solução durante o processo de combustão, no entanto, em virtude dos altos valores da taxa de queima de combustível, pode-se considerar que durante este período a influência de tais fatores não são relevantes.

Uma vez que o objetivo perseguido é analisar a evolução do processo de combustão, a discussão subsequente será focalizada na parte do ciclo compreendida entre o ângulo de manivela correspondente ao início da elevação rápida da taxa de queima de combustível, e o ângulo de manivela quando este parâmetro se torna negativo. Será admitido que a combustão ocorre somente neste período em que a taxa de queima de combustível é positiva. Para se certificar que este intervalo é realmente representativo do processo de combustão, a taxa de queima de combustível foi integrada nesse domínio, verificando-se que a massa calculada de combustível queimado corresponde a 95.0, 98.6 e 98.6% da massa de combustível injetada por ciclo, nas condições dos Ensaio 1, 2 e 3 respectivamente,

o que demonstra que a hipótese é adequada.

As Figuras 6.6 e 6.7 mostram respectivamente a temperatura e a taxa de queima de combustível na faixa de interesse.

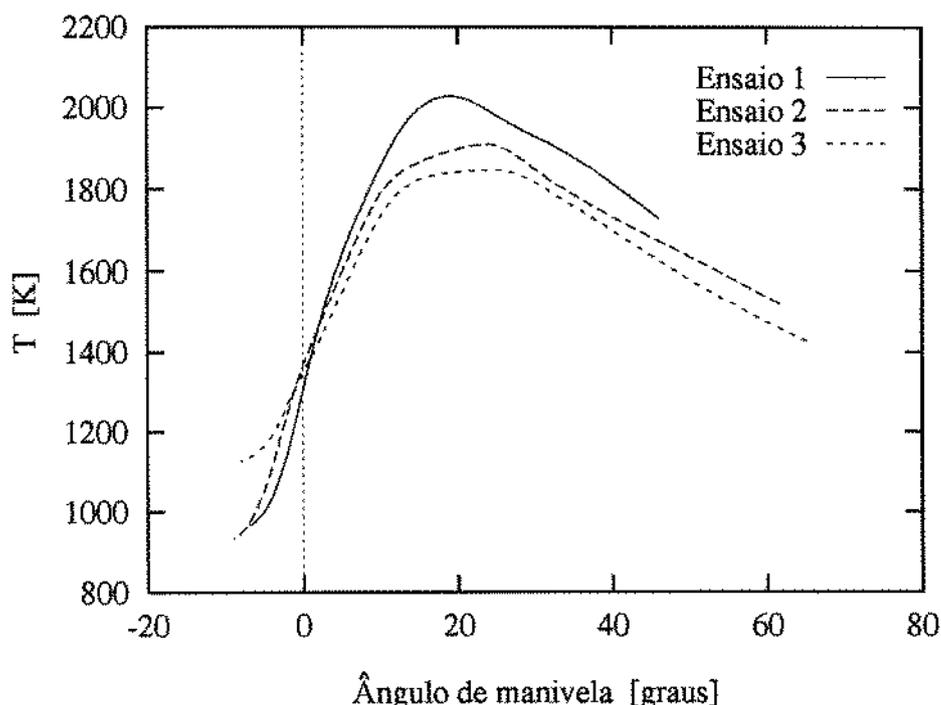


Figura 6.6: A temperatura dos gases durante a combustão.

As exergias termoquímica, química e termomecânica, assim como os termos do balanço de exergia foram também calculados. Estes parâmetros são mostrados nas Figuras 6.8 e 6.9 para o caso do *Ensaio 2*. Pode-se constatar a partir da Figura 6.8, que a exergia química dos gases é relativamente pequena quando comparada à exergia termomecânica. A Figura 6.9 mostra que o fluxo de exergia associado à transferência de calor (curva Q) é relativamente pequeno quando comparado com os outros termos do balanço de exergia, o que demonstra que as tentativas de se evitar perdas por transferência de calor não devem levar a grandes ganhos em termos de trabalho disponível. Em contraste, as perdas de exergia associadas à destruição por irreversibilidades são consideráveis, o que as torna merecedoras de um estudo mais aprofundado que permita determinar até que ponto é possível se evitar estas perdas.

A Figura 6.10 mostra a taxa de destruição de exergia devido às irreversibilidades, para os três casos considerados. Pode ser observado que estas curvas seguem essencialmente o formato da taxa de queima de combustível (Figura 6.7), no entanto, o pico que caracteriza a combustão pré misturada ganha maior destaque do que naquelas curvas.

Atendendo ao fato que a taxa de destruição de exergia não providencia um critério de comparação que permita levar em conta a quantidade de

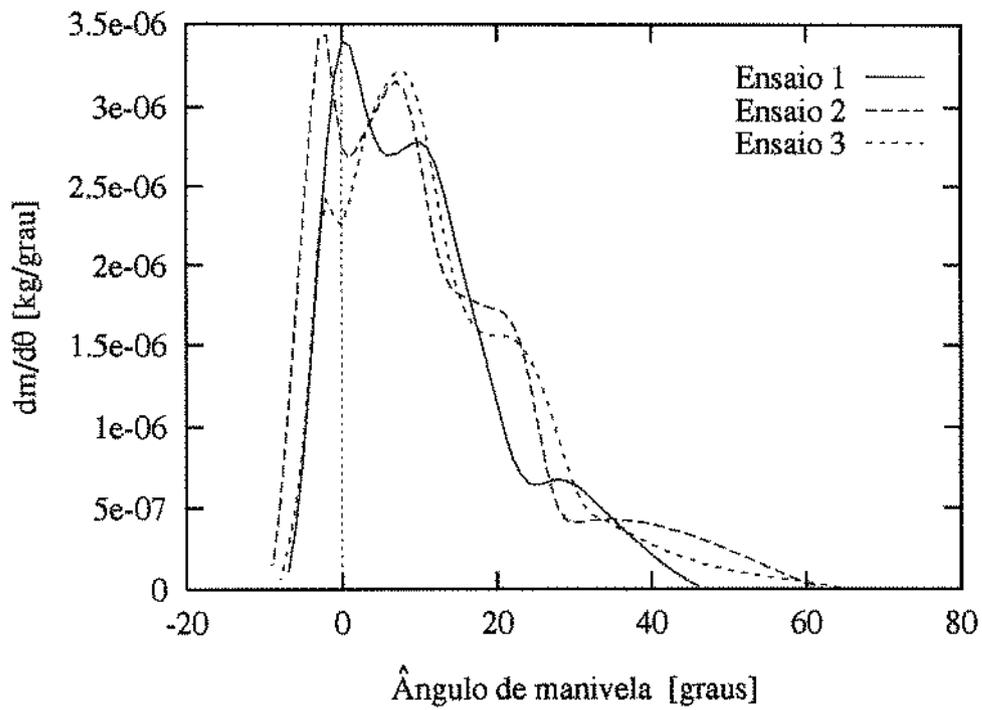


Figura 6.7: A taxa de queima de combustível — Ensaios 1, 2 e 3.

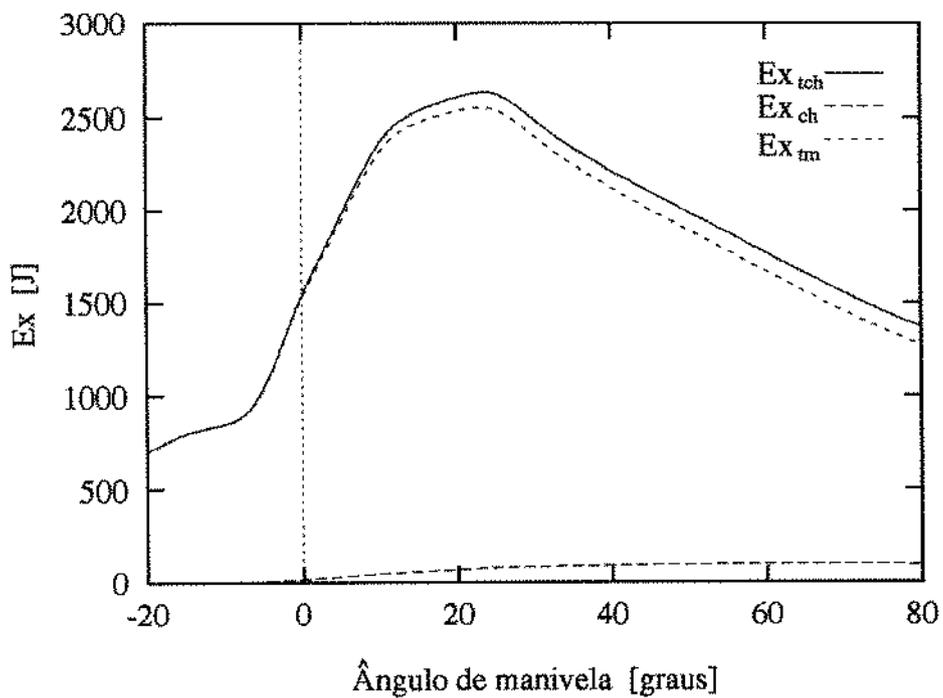


Figura 6.8: As exergias termoquímica, química e termomecânica — Ensaio 2.

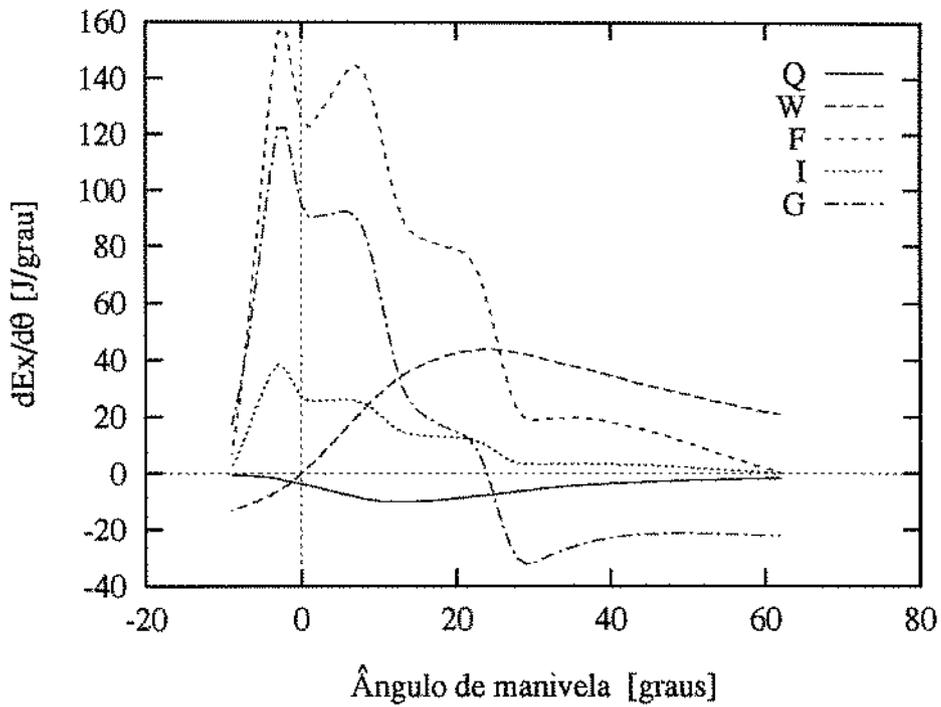


Figura 6.9: Os termos do balanço de exergia — Ensaio 2.

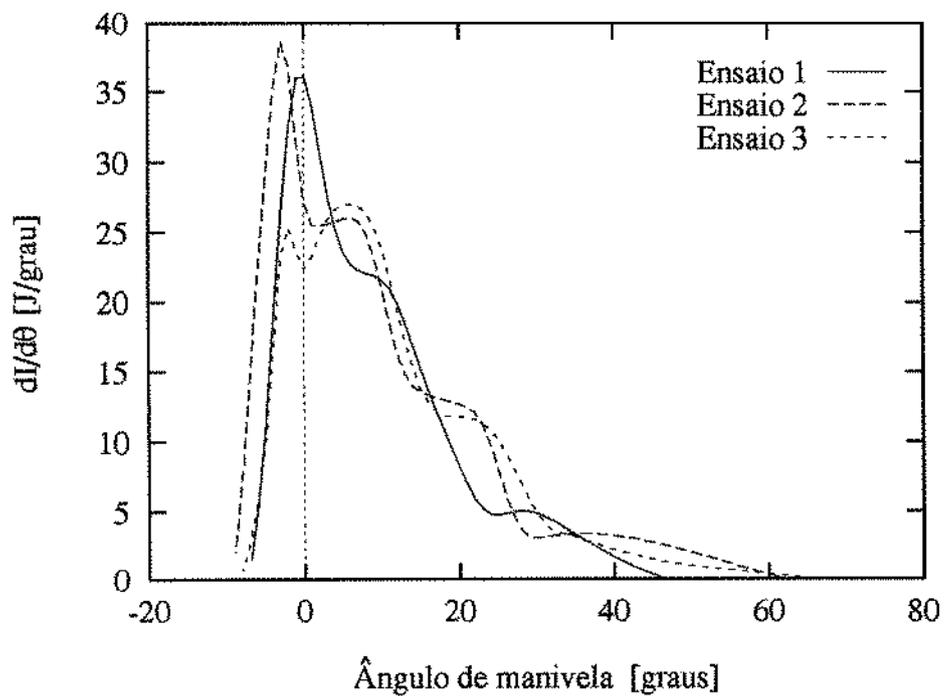


Figura 6.10: A taxa de destruição de exergia.

combustível que está sendo queimado a cada instante, num trabalho prévio onde foram publicados os resultados desta seção [119], foi proposto avaliar o processo de combustão baseando-se na *taxa de destruição de exergia por unidade de massa de combustível queimado* (dI/dm_f). Este parâmetro resulta apropriado para se comparar diferentes trechos do processo de combustão ou para se determinar as condições em que a combustão ocorre de forma menos irreversível, nos casos em que se trata de um único combustível, onde, como se sabe, existe uma relação direta entre o fluxo de massa do combustível e o fluxo de exergia associado a ele. Este é o caso da referência [119]. Entretanto, quando se analisa processos de combustão envolvendo diversos combustíveis (seja o caso de motores com injeção piloto ou quando se compara motores que operam com diferentes combustíveis), este parâmetro resulta inadequado pois ele não reflete as propriedades exergéticas dos diferentes combustíveis. Para esses casos, propõe-se que seja utilizada a *fração de exergia do combustível, destruída por irreversibilidades* (dI/dEx_f), ou também, a fração não destruída ($1 - dI/dEx_f$) a qual não é outra coisa senão a *eficiência termodinâmica instantânea* do processo de combustão. Ambos estes parâmetros são mostrados nas Figuras 6.11 e 6.12.

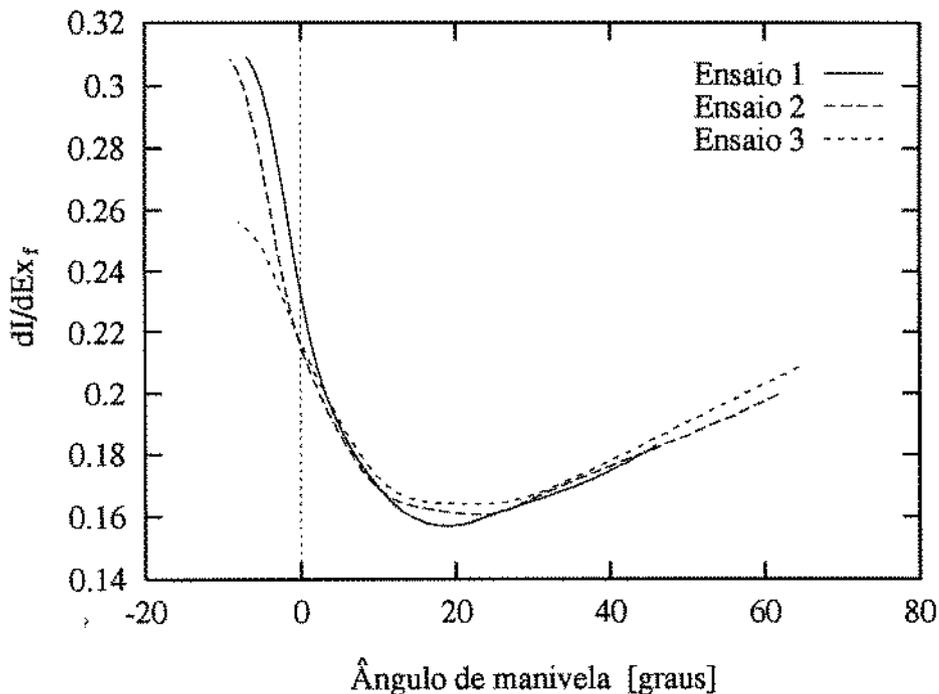


Figura 6.11: A fração (instantânea) de exergia do combustível destruída por irreversibilidades.

As Figuras 6.11 e 6.12 mostram claramente que uma considerável parcela da exergia do combustível (entre 15 e 30%) acaba sendo destruída por irreversibilidades da combustão. Percebe-se pela Figura 6.12 que na faixa onde ocorre a combustão na fase pré-misturada, o valor da eficiência termodinâmica

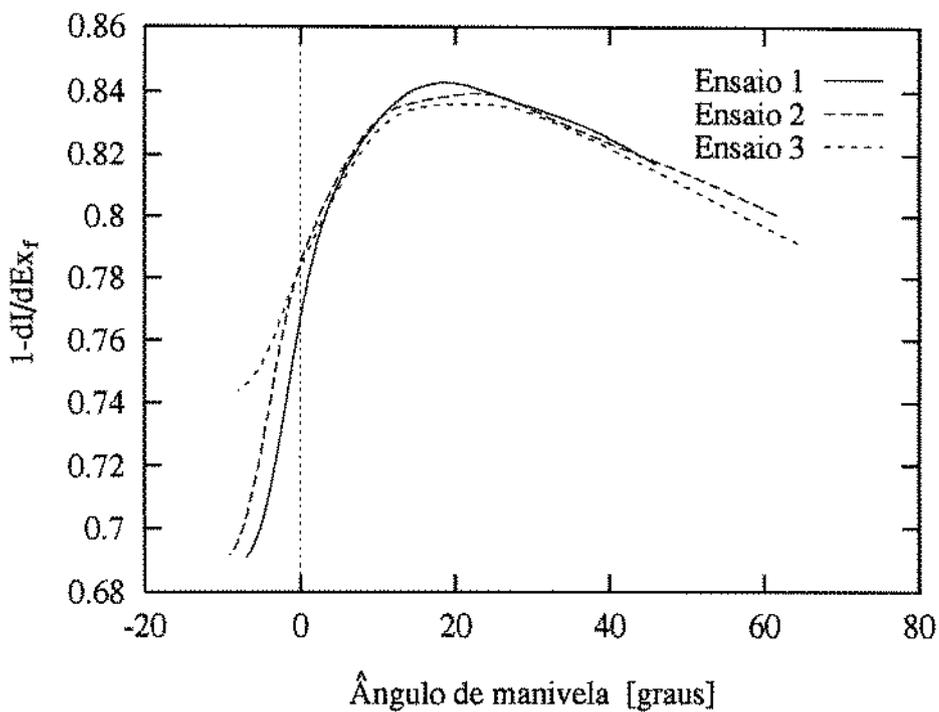


Figura 6.12: A eficiência termodinâmica instantânea da combustão.

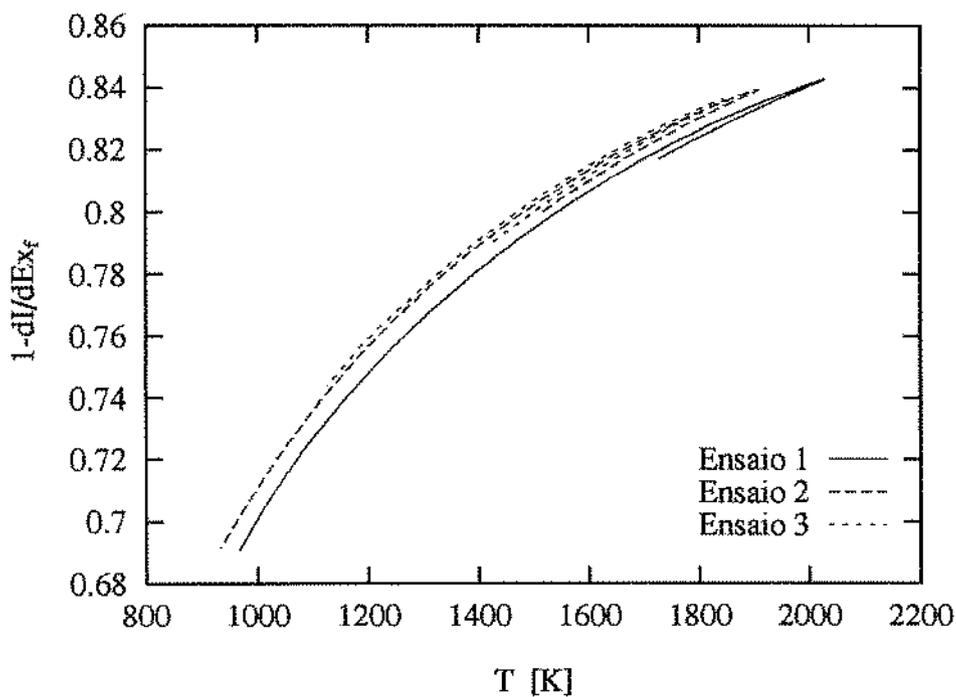


Figura 6.13: A eficiência termodinâmica instantânea da combustão em função da temperatura.

instantânea é em geral menor que na região correspondente à fase difusiva da combustão. Um outro aspecto que chama a atenção é a semelhança entre as curvas de eficiência termodinâmica instantânea e as curvas de temperatura (Figura 6.6). A Figura 6.13 mostra a eficiência termodinâmica instantânea em função da temperatura. Neste gráfico nota-se claramente aquilo que tinha sido ressaltado no trabalho [119] — o aumento da temperatura determina que a combustão se torne menos destrutiva e portanto mais eficiente.

6.2 Resultados Obtidos com o Modelo Preditivo.

Com o objetivo de se ilustrar os resultados que podem ser obtidos usando-se o modelo preditivo, foi feita a simulação do ciclo de trabalho de um motor hipotético, cujas dimensões foram cuidadosamente escolhidas a partir de dados publicados na literatura. O motor simulado é de injeção direta e de aspiração natural, para o qual foi adotado um formato cilíndrico de câmara de combustão, visando facilitar a determinação da área de troca de calor do pistão. Na Tabela 6.2 são mostrados os dados requeridos pelo modelo, correspondentes ao regime de funcionamento simulado. Em princípio o modelo permite a alteração de qualquer um dos dados listados na tabela. Assim é possível se efetuar estudos paramétricos visando a otimização do desempenho e da eficiência do motor.

6.2.1 O Caso Simulado.

Nas Figuras 6.14 e 6.15 são mostrados o diagrama pressão-volume e a temperatura dos gases no cilindro respectivamente, obtidos para as condições especificadas na Tabela 6.2.

A taxa de queima de combustível, descrita por meio da função dupla de Wiebe e a taxa de transferência de calor calculada pela correlação de Woschni, são mostradas nas Figuras 6.16 e 6.17. Na Figura 6.16 se percebe claramente as duas fases da combustão — a região que sobressai corresponde à combustão pré-misturada, enquanto que a região de menor destaque corresponde à fase difusiva da combustão. Na Figura 6.17 pode ser visto que a taxa de transferência de calor é descontínua nos pontos correspondentes à abertura da válvula de escape e ao fechamento da válvula de admissão. Esta descontinuidade, que não tem consistência física, é causada pela alteração dos coeficientes da correlação de Woschni, no início do processo de escape e no fim da admissão.

Como foi mencionado no Capítulo 5, o modelo preditivo resolve as equações que governam os escoamentos nos dutos de admissão e escape, e permite que os parâmetros destes escoamentos sejam determinados em função do espaço e do tempo. Nas Figuras 6.18 e 6.19 são mostradas a pressão e a temperatura dos gases que escoam no duto de admissão, em função da coordenada espacial (z) e do ângulo de manivela após a abertura da válvula ($\Delta\theta$). Nes-

Tabela 6.2: Dados do modelo preditivo.

Dados da geometria do motor	
Taxa de compressão	16
Comprimento da biela [m]	0.229
Diâmetro do cilindro [m]	0.105
Deslocamento do pistão [m]	0.109
Diâmetro da câmara de combustão [m]	0.060
Folga entre o pistão e o cabeçote no PMS [m]	0.001
Comprimento do duto de admissão [m]	0.480
Diâmetro do duto de admissão [m]	$D = D(z)$
Comprimento do duto de escape [m]	0.360
Diâmetro do duto de escape [m]	$D = D(z)$
Área relativa na entrada do duto de admissão	100%
Área relativa na saída do duto de escape	100%
Dados operacionais	
Frequência de rotação [rpm]	3200
Pressão na entrada do duto de admissão [bar]	0.9708
Temperatura na entrada do duto de admissão [K]	307
Pressão na saída do duto de escape [bar]	0.9708
Temperatura na saída do duto de escape [K]	307
Relação de equivalência	0.85
Condições iniciais	
Velocidade do gás nos dutos [m/s]	0
Pressão no cilindro [bar]	1.37
Temperatura no cilindro [K]	435
Relação de equivalência no cilindro	0.026
Ângulo de manivela [graus]	-121
Pressão no duto de admissão [bar]	0.9708
Temperatura no duto de admissão [K]	307
Pressão no duto de escape [bar]	0.9708
Temperatura no duto de escape [K]	900
Temperatura das paredes [K]	
Cabeçote	538
Pistão	637
Cilindro	598
Válvula de admissão	702
Válvula de escape	1016
Duto de admissão	$T = T(z)$
Duto de escape	$T = T(z)$
Atrito nos dutos	
Coeficiente de atrito no duto de admissão	0.002
Coeficiente de atrito no duto de escape	0.005

Dados do modelo de liberação de energia	
Ângulo de manivela no início da combustão	-12
Duração da combustão [graus]	95
Duração da fase pré-misturada [graus]	25
Fração de combustível que queima na fase pré-misturada	0.45
Fator de forma do modelo de Wiebe (fase pré-misturada)	2.5
Fator de forma do modelo de Wiebe (fase difusiva)	1.5
Dados da válvula de admissão	
Ângulo de abertura da válvula [graus]	349
Duração do processo de admissão [graus]	250
Diâmetro interno da válvula [m]	0.048
Diâmetro interno do assento de válvula [m]	0.048
Diâmetro externo do assento de válvula [m]	0.052
Diâmetro da haste [m]	0.012
Ângulo de assento [graus]	45
Elevação adimensional máxima	0.20
Relação de acelerações no modelo parabólico	-4.0
Dados da válvula de escape	
Ângulo de abertura da válvula [graus]	115
Duração do processo de escape [graus]	254
Diâmetro interno da válvula [m]	0.043
Diâmetro interno do assento de válvula [m]	0.043
Diâmetro externo do assento de válvula [m]	0.047
Diâmetro da haste [m]	0.010
Ângulo de assento [graus]	45
Elevação adimensional máxima	0.25
Relação de acelerações no modelo parabólico	-4.0
Dados do ar ambiental	
Pressão [bar]	1.0135
Temperatura [K]	298
Fração molar de O_2	0.2082
Fração molar de N_2	0.7760
Fração molar de CO_2	0.0003
Fração molar de H_2O	0.0062
Fração molar de Ar	0.0093
Dados do combustível	
Fórmula empírica	$C_{14.4}H_{24.9}$
Entalpia às condições ambientais [kJ/kg]	-305.2
Entropia às condições ambientais [kJ/kg-K]	2.656
Entalpia às condições de saída do injetor [kJ/kg]	-179.2
Entropia às condições de saída do injetor [kJ/kg-K]	2.869
Poder calorífico inferior [MJ/kg]	42.94

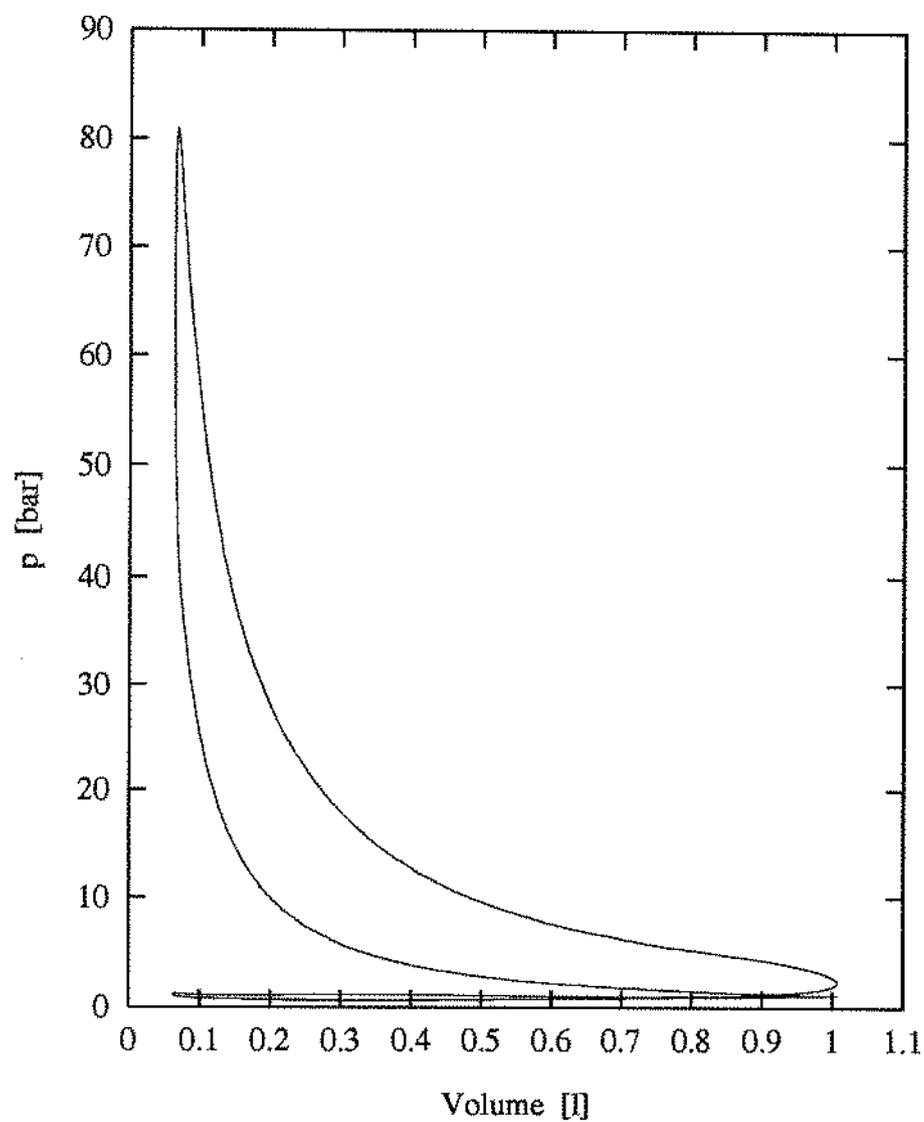


Figura 6.14: O diagrama $p-V$.

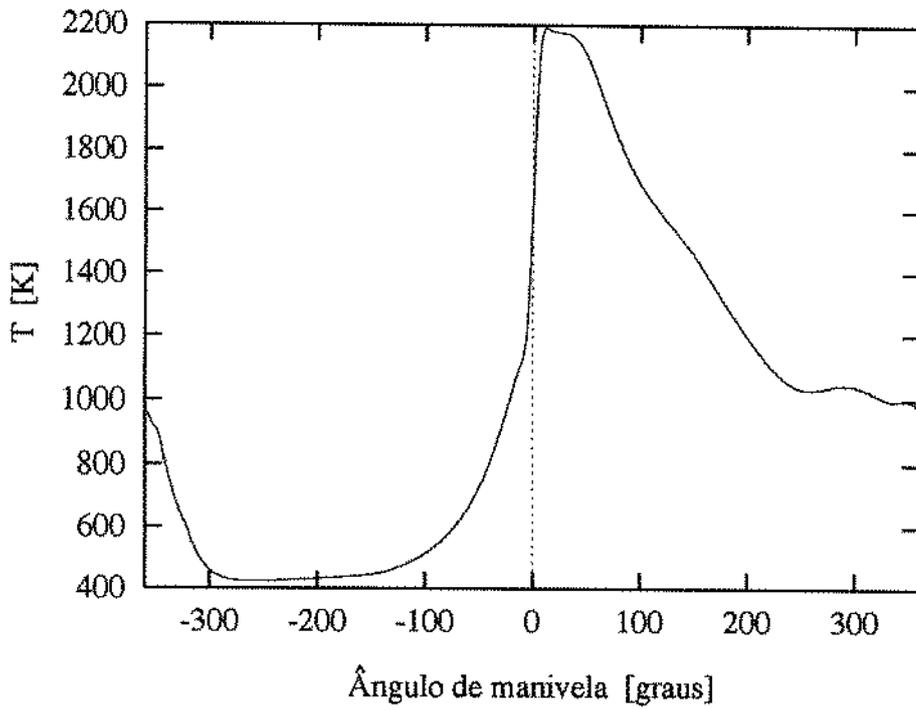


Figura 6.15: A temperatura dos gases no cilindro.

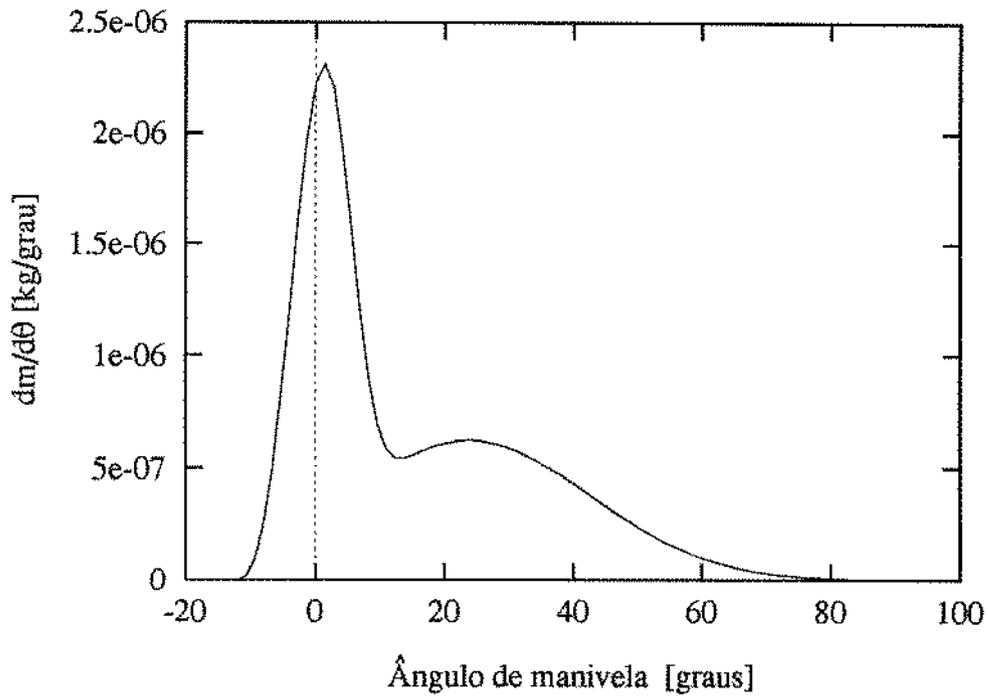


Figura 6.16: A taxa de queima de combustível.

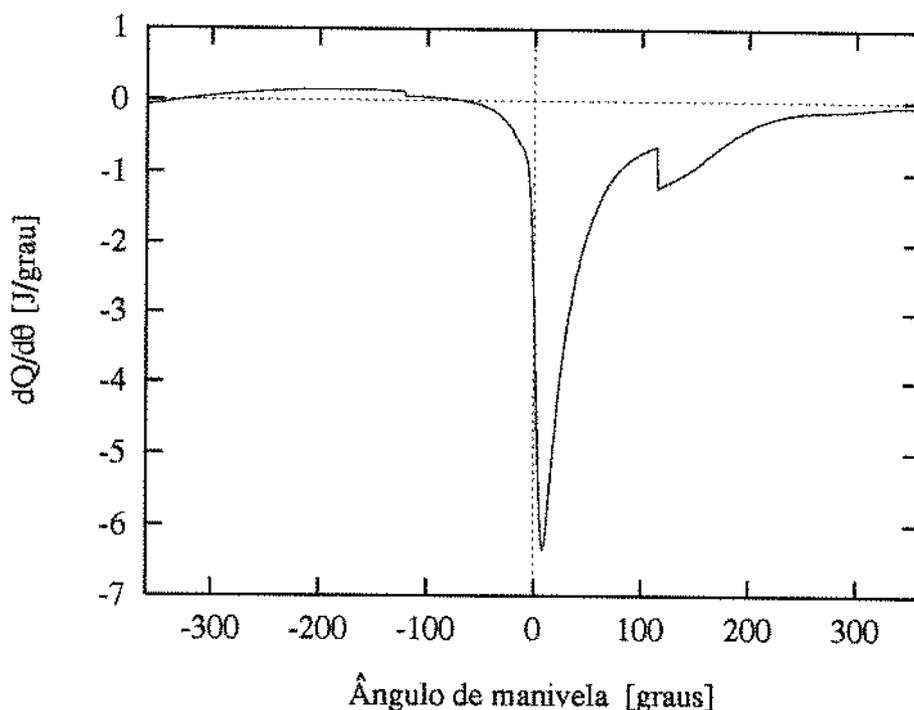


Figura 6.17: A taxa de transferência de calor.

tas figuras, a posição da válvula de admissão corresponde a $z = 48$ cm. Na Figura 6.18 pode ser observado que no momento de abertura da válvula, a depressão no cilindro provoca a formação de uma onda de rarefação no extremo da válvula. Esta onda se propaga na direção do extremo livre do duto, e se reflete como uma onda de compressão. Por isso, a partir de aproximadamente 110 graus após o início do processo de admissão, a pressão nas proximidades da válvula se torna maior que a pressão de admissão (esta última igual a 0.9708 bar). A onda de compressão é refletida no extremo da válvula como uma onda de rarefação provocando a queda da pressão nesta seção no final do evento (a partir de aproximadamente 200 graus após o início da admissão). Durante este último trecho do processo de admissão, o pistão se desloca na direção do ponto morto superior, comprimindo os gases no cilindro. Assim, a pressão no cilindro resulta maior que a pressão no duto, o que causa o escoamento reverso (do cilindro ao duto de admissão). Estes detalhes podem ser claramente observados na Figura 6.20.

A Figura 6.19 mostra que na maior parte do processo de admissão, a temperatura dos gases no duto permanece próxima à temperatura na entrada do duto, exceto no início e no final deste processo, quando ocorre escoamento reverso e então uma pequena parcela dos gases quentes que se encontram no cilindro acaba entrando no duto.

As Figuras 6.21 e 6.22 mostram respectivamente a pressão e a temperatura dos gases no duto de exaustão. Nestas figuras, a posição da válvula de escape corresponde a $z = 0$ cm. Pode-se observar pela Figura 6.21 que no início

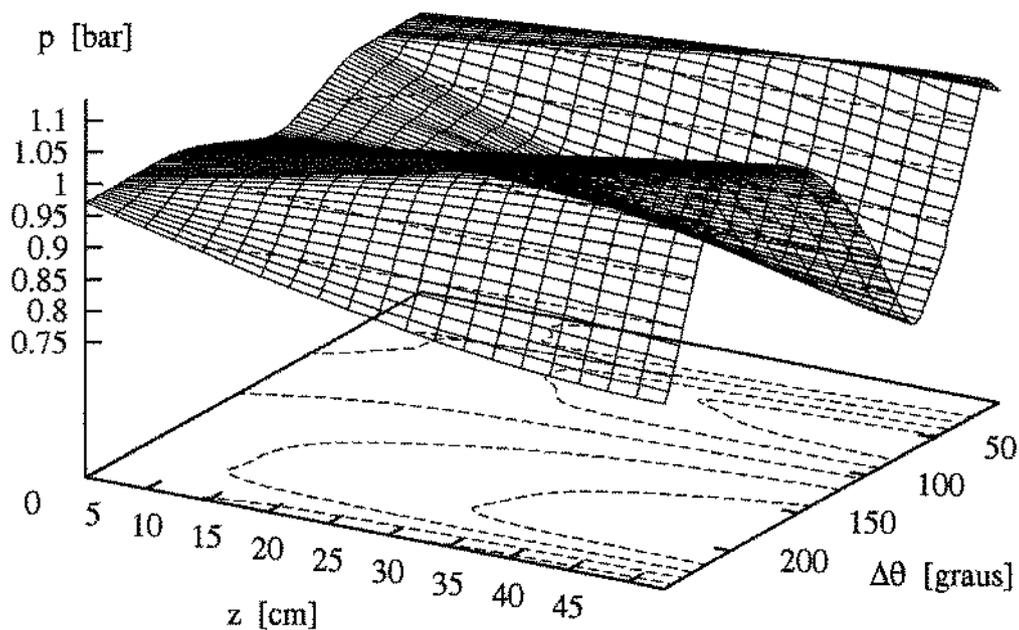


Figura 6.18: A pressão no duto de admissão.

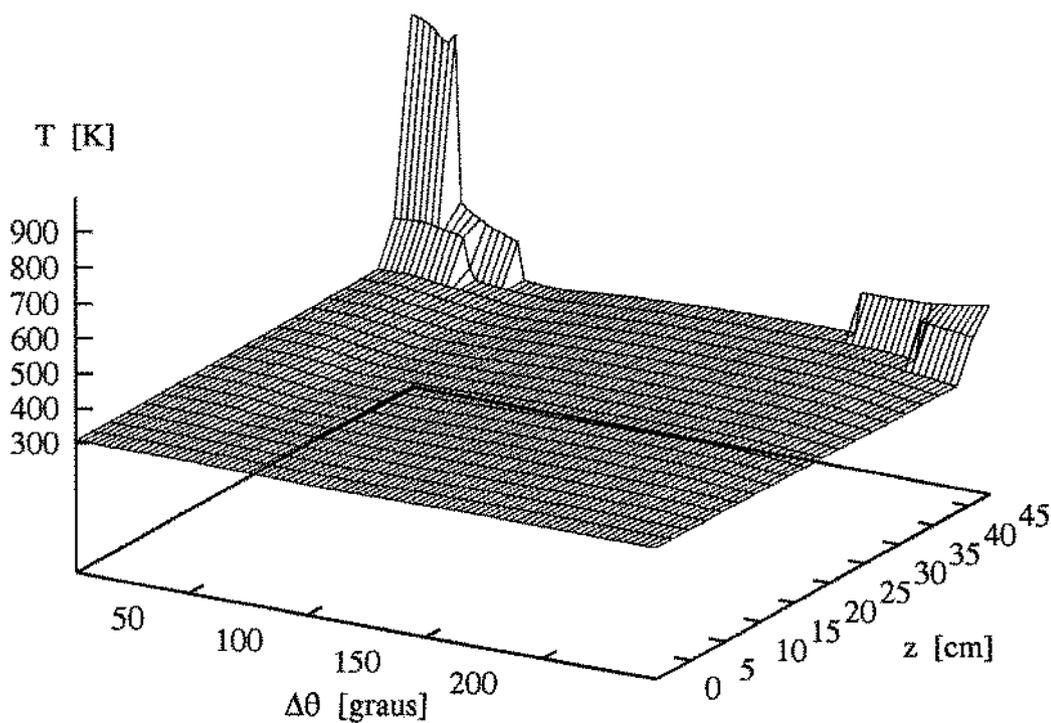


Figura 6.19: A temperatura no duto de admissão.

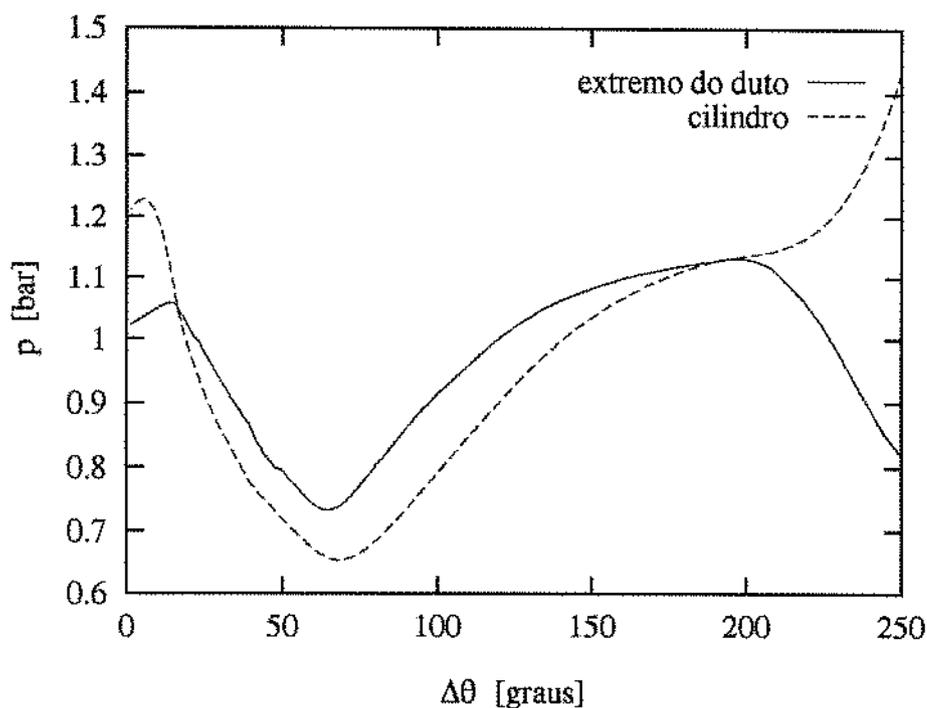


Figura 6.20: A pressão no extremo da válvula de admissão e no cilindro, em função do ângulo após o início da admissão.

da exaustão, no extremo do duto adjacente à válvula, se forma uma onda de pressão, a qual é refletida no outro extremo do duto como uma onda de rarefação. Esta onda de rarefação atinge o extremo da válvula aproximadamente 80 graus após o início do evento, provocando um aumento da vazão de descarga. Na Figura 6.22 pode ser notado que a diferença de temperaturas entre o fluido que se encontra no cilindro no momento de abertura da válvula de escape e o fluido que se encontra no duto, origina uma descontinuidade na distribuição de temperatura, a qual é propagada ao longo do duto.

As Figuras 6.23 e 6.24 mostram a vazão de massa através das válvulas e o número de Mach na seção de área mínima da válvula. Na Figura 6.23 pode-se perceber a correspondência que existe entre os momentos em que a vazão através das válvulas é máxima, e os momentos de chegada das ondas que favorecem o aumento destas vazões (Figuras 6.18 e 6.21). Pode-se notar, também nesta figura, a ocorrência de escoamento reverso no trecho final do processo de admissão. Este escoamento reverso começa antes do início do movimento ascendente do pistão (-180 graus) o que se explica em função da propagação de ondas no duto, as quais provocam que a pressão no extremo da válvula diminua chegando a ficar abaixo da pressão no cilindro. Posteriormente, quando o pistão inicia seu deslocamento ascendente, a pressão no cilindro aumenta, enquanto a pressão no duto continua a diminuir, favorecendo-se assim o aumento da vazão do escoamento reverso (apesar da constante diminuição da área de passagem na válvula). Mais no fim do processo de admissão, o escoamento reverso

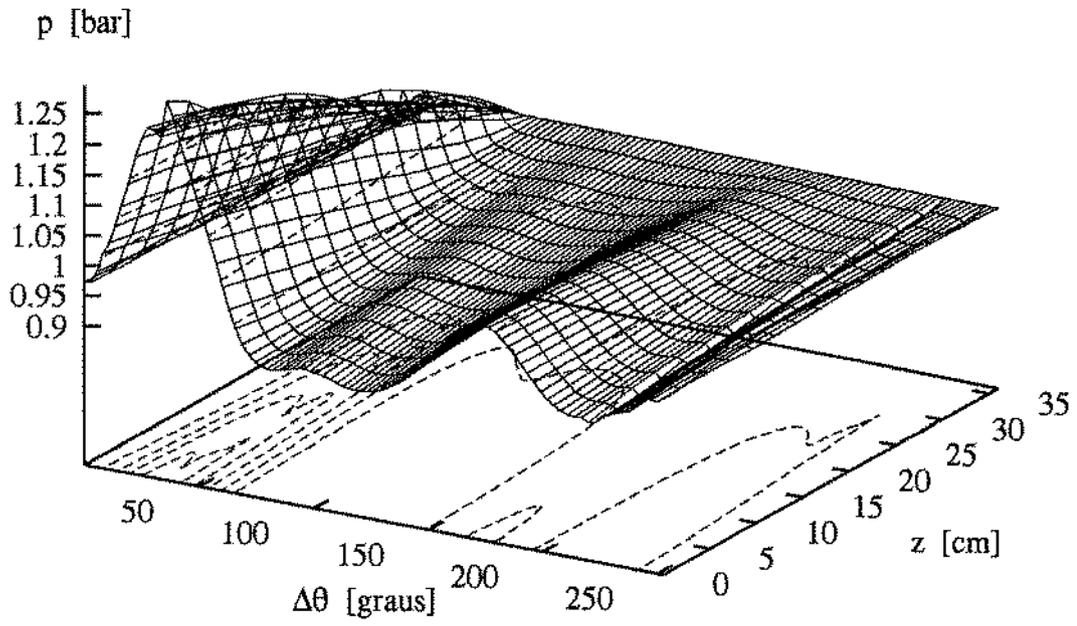


Figura 6.21: A pressão no duto de escape.

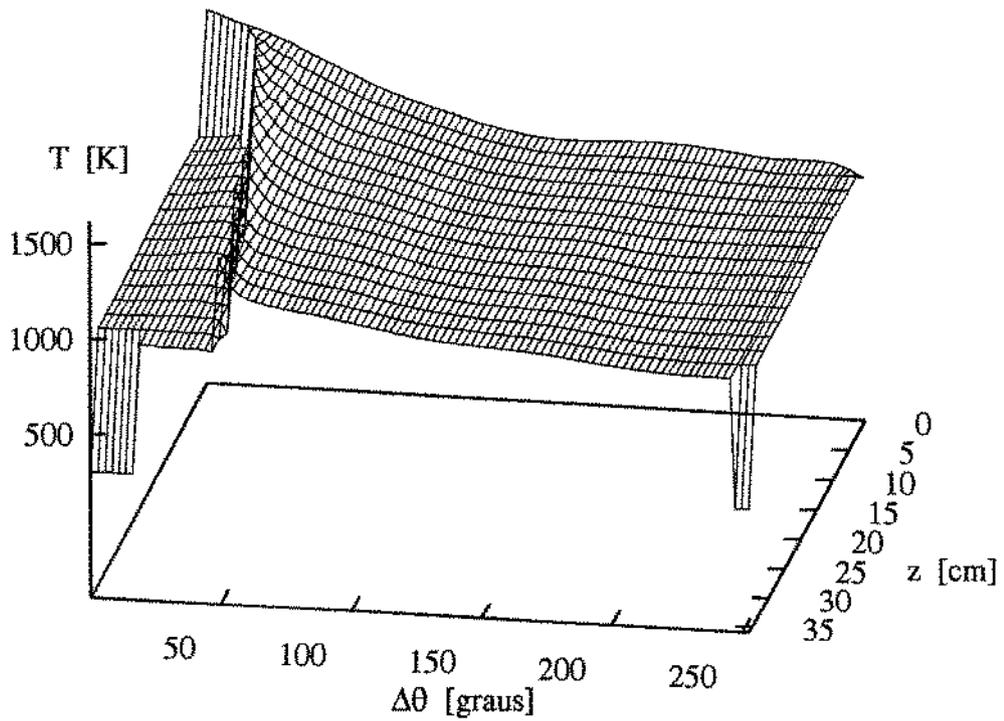


Figura 6.22: A temperatura no duto de escape.

diminui em função da redução da área de passagem na válvula. A Figura 6.24 mostra que no início do processo de exaustão, a velocidade do gás na seção de área mínima da válvula é sônica, o que se deve a que a relação de pressões à montante e à jusante da válvula excede a relação crítica.

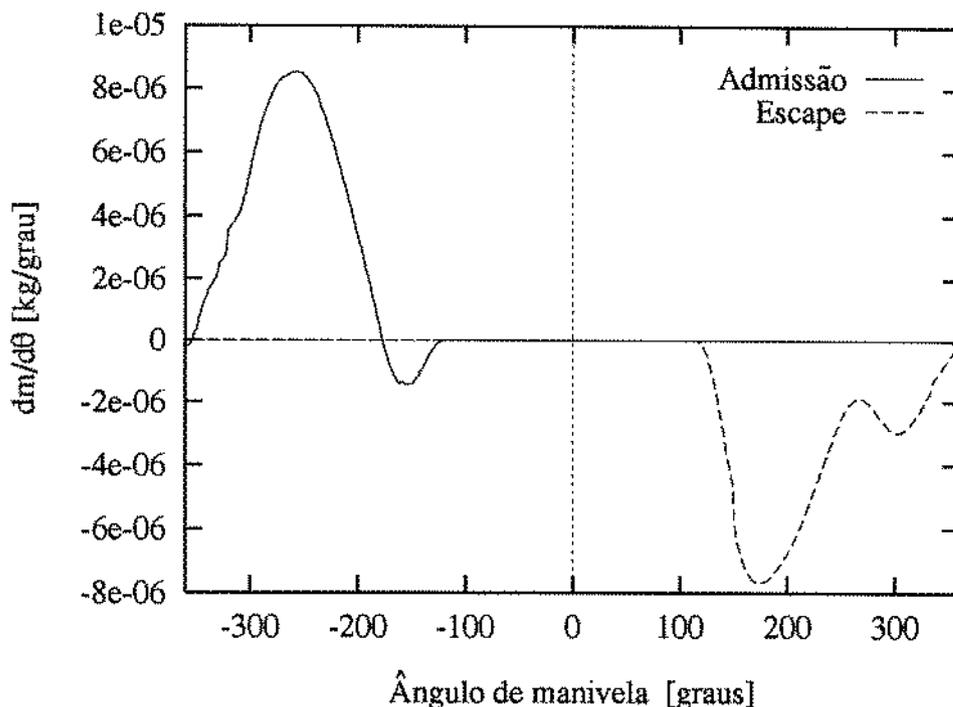


Figura 6.23: O fluxo de massa através das válvulas.

Análise Exergética do Ciclo do Motor.

O modelo preditivo permite calcular os termos do balanço de exergia, e as exergias termoquímica, química e termomecânica do volume de controle mostrado na Figura 3.1. Apenas para visualizar melhor os resultados obtidos, estes serão mostrados separadamente para os processos de admissão, compressão, combustão-expansão e exaustão.

Na Figura 6.25 são mostrados os termos do balanço de exergia para o processo de admissão. Observa-se nesta figura que a taxa de variação da exergia dentro do volume de controle associada à transferência de calor (curva "Q"), é insignificante durante este processo, o que se deve a que a própria taxa de transferência de calor é muito pequena, como pode ser visto pela Figura 6.17. O termo que caracteriza a taxa de perda da exergia do sistema devido à produção de trabalho (curva "W"), mostra um ponto de mínimo em torno de -300 graus. Pode-se ver pela Figura 6.26, que em torno desse mesmo ponto os valores da pressão no cilindro são os menores registrados durante o ciclo todo, e que esses valores são menores que a pressão ambiental. Assim, embora os gases estejam

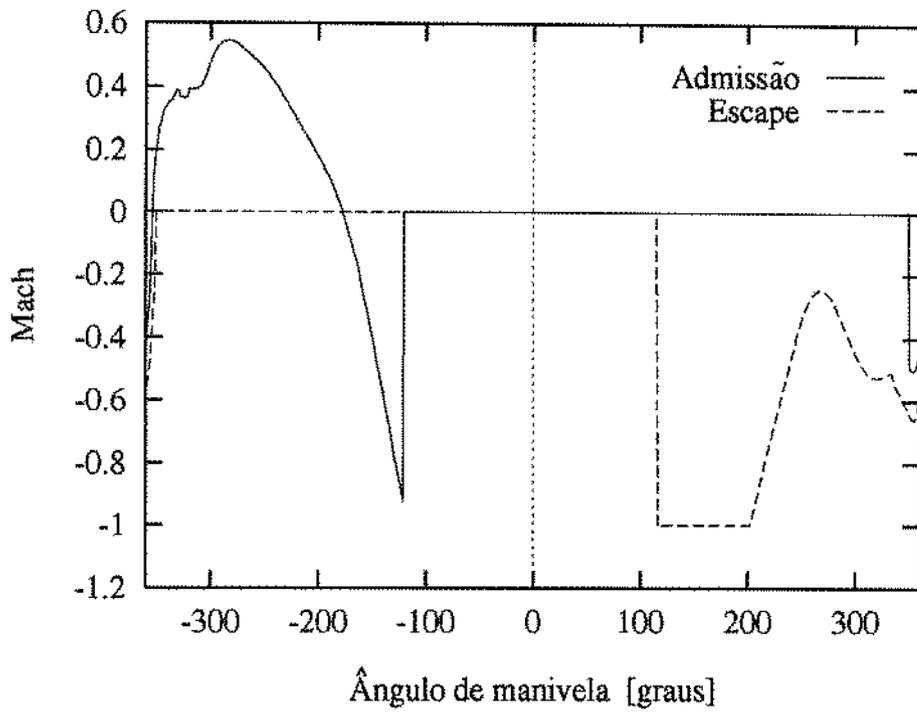


Figura 6.24: O número de Mach na seção de área mínima das válvulas.

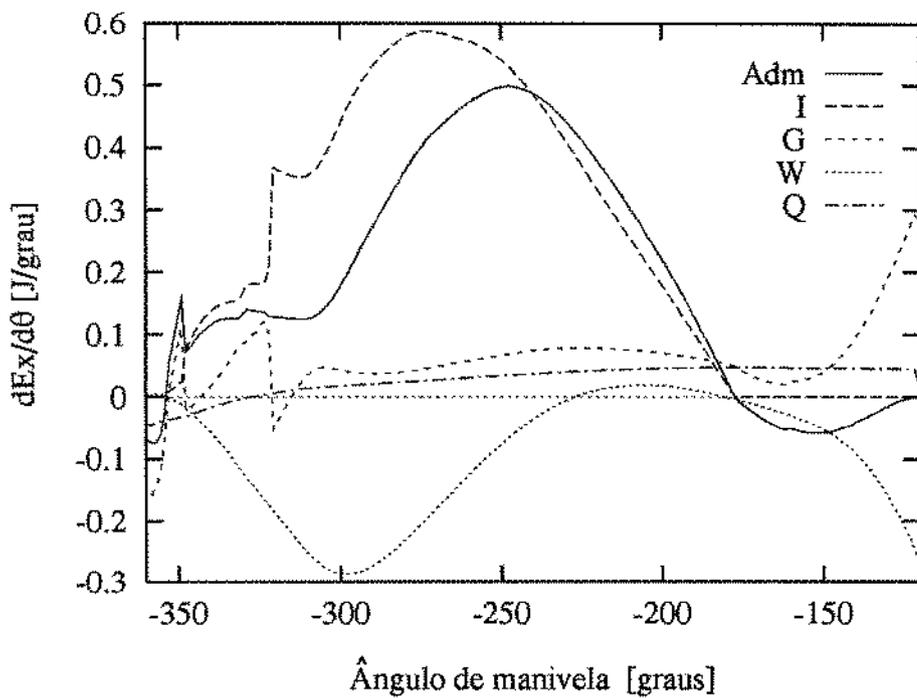


Figura 6.25: Os termos do balanço de exergia durante a admissão.

se expandindo, o sistema está ganhando exergia uma vez que esta expansão leva o sistema a um estado mais afastado daquele do meio ambiente. A taxa

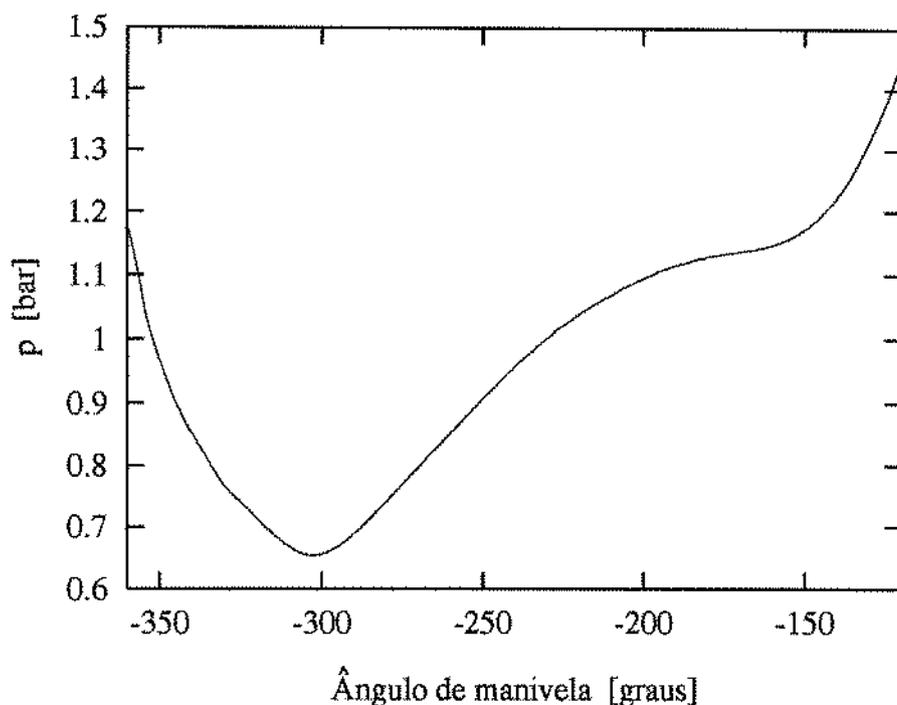


Figura 6.26: A pressão no cilindro durante a admissão.

de entrada de exergia ao volume de controle, associada aos gases que ingressam pela válvula de admissão (curva “Adm” na Figura 6.25), apresenta um pico em torno de -350 graus do ângulo de manivela. Este pico deve ser atribuído à entrada daqueles gases que instantes antes tinham saído do cilindro no escoamento reverso através da válvula de admissão. Pode ser visto na Figura 6.19 que no início do processo de admissão, os gases que se encontram nas proximidades da válvula de admissão possuem temperatura bastante elevada, o que demonstra que esses gases entraram no duto com o escoamento reverso. Quando o ângulo de manivela é aproximadamente igual a -330 graus, observa-se uma outra irregularidade na curva da taxa de entrada de exergia com os gases admitidos. Esta irregularidade se explica em função da sinuosidade observada na curva de vazão através da válvula de admissão (Figura 6.23), a qual por sua vez decorre da variação pronunciada apresentada pela curva de área mínima efetiva de passagem através da válvula (Figura 6.27). Deve ser notado que a outra irregularidade que esta curva apresenta em torno de -170 graus do ângulo de manivela, também afeta a curva de vazão (Figura 6.23) e a taxa de entrada de exergia com os gases admitidos (curva “Adm” na Figura 6.25), embora neste caso a perturbação seja quase imperceptível. Um outro aspecto que chama a atenção refere-se ao aumento repentino da taxa de destruição de exergia por irreversibilidades (curva “I” na Figura 6.25) decorrente do aumento abrupto da área efetiva de passagem através da válvula de admissão, o que por sua vez

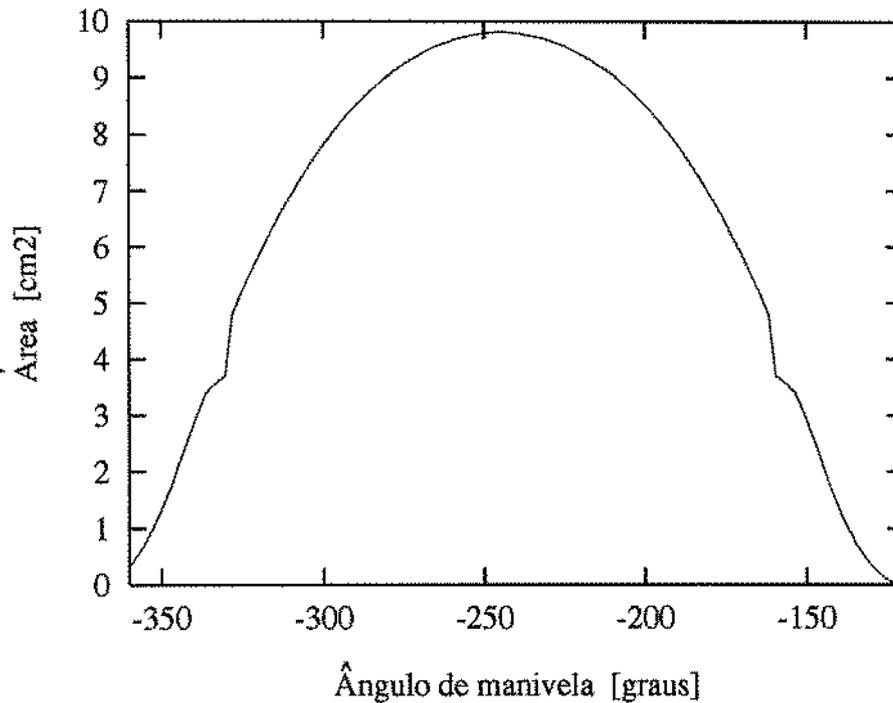


Figura 6.27: A área efetiva de passagem através da válvula de admissão.

determina o aumento pronunciado da vazão através da válvula observado na Figura 6.23. Em geral pode-se dizer que o processo de admissão é altamente dissipativo, uma vez que toda a exergia que entra no cilindro com os gases admitidos acaba sendo destruída. Isto deve-se a que o processo de admissão envolve fenômenos tais como estrangulamento do escoamento na válvula, mistura de gases que se encontram em distintos estados termodinâmicos e a redução da velocidade do escoamento de admissão até a total estagnação (no modelo admite-se que o gás no cilindro possui energia cinética desprezível, o que de fato é uma aproximação). A Figura 6.28 mostra as exergias termoquímica e química dos gases no cilindro. Pode-se notar nesta figura que apesar do aumento da massa dos gases no cilindro, a exergia termoquímica do sistema diminui, o que demonstra que o processo é dissipativo. A Figura 6.29 mostra a exergia termoquímica do sistema por unidade de massa dos gases, nessa figura fica mais evidente ainda o caráter dissipativo do processo de admissão.

A Figura 6.30 mostra os termos do balanço de exergia para o processo de compressão. Observa-se nesta figura que o único termo significativo neste processo é aquele que considera a taxa de perda de exergia do sistema, associada à produção de trabalho (curva "W"). Este termo segue essencialmente o formato da taxa de produção de trabalho pelo volume de controle, a qual é mostrada na Figura 6.31. Nota-se na Figura 6.30 que a exergia dos gases aumenta durante todo o processo de compressão, devido ao trabalho de compressão efetuado sobre os gases no cilindro. Este fato fica mais evidente na Figura 6.32, onde são mostradas as exergias termoquímica e química do sistema.

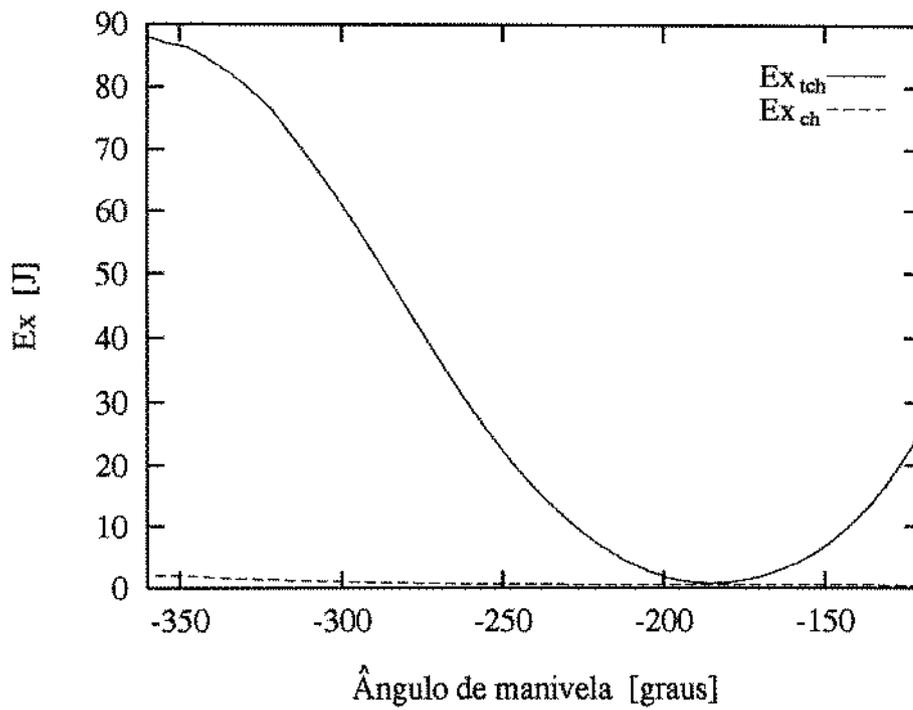


Figura 6.28: As exergias termoquímica e química durante a admissão.

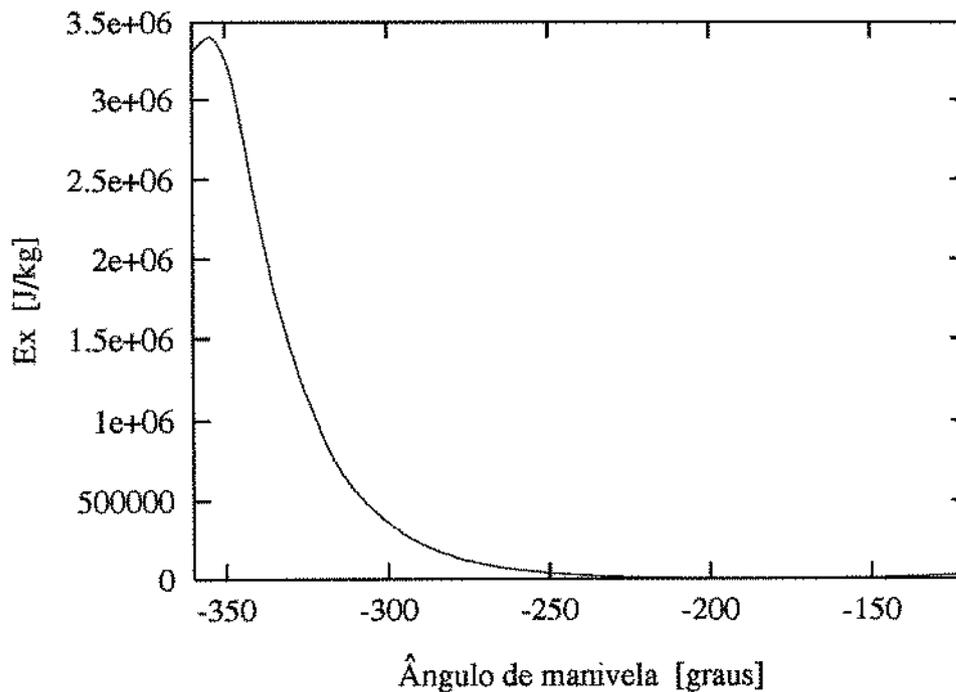


Figura 6.29: A exergia termoquímica por unidade de massa durante a admissão.

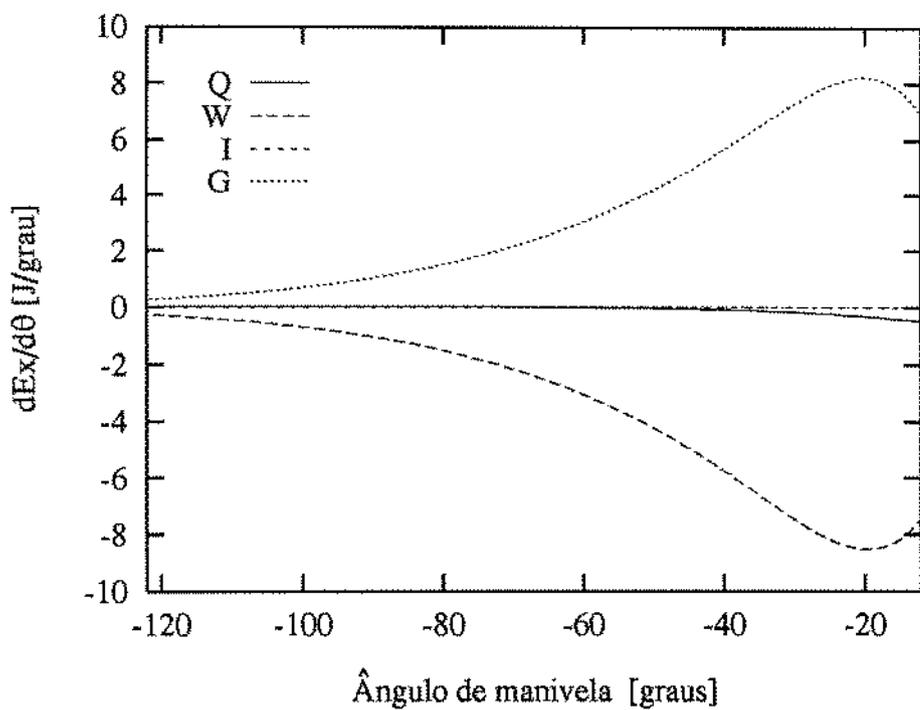


Figura 6.30: Os termos do balanço de exergia durante a compressão.

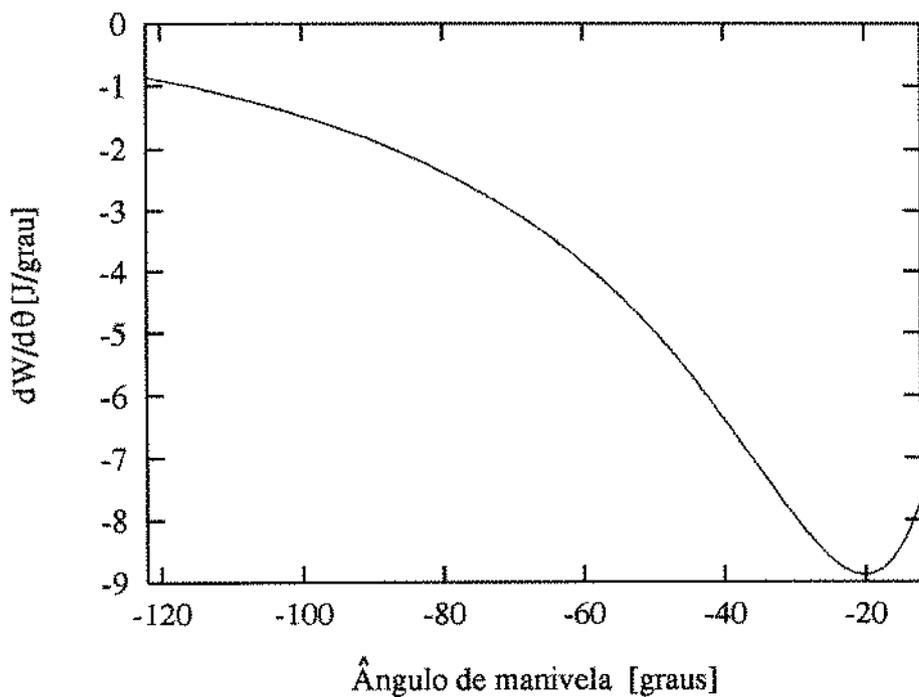


Figura 6.31: A taxa de produção de trabalho pelos gases no cilindro durante a compressão.

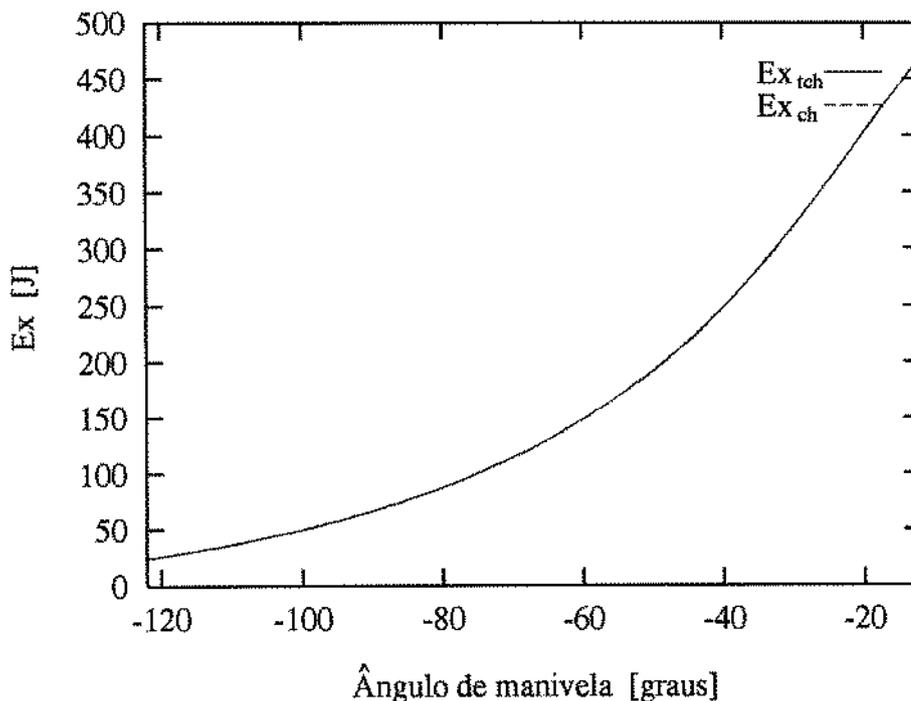


Figura 6.32: As exergias termoquímica e química durante o processo de compressão.

Na Figura 6.33 são mostrados os termos do balanço de exergia durante os processos de combustão e expansão. A taxa de destruição da exergia do sistema devido à irreversibilidades da combustão (curva "I") segue o formato da taxa de entrada de exergia com o combustível (curva "F"). A eficiência termodinâmica instantânea da combustão, como definida na seção anterior, é mostrada na Figura 6.34, onde pode-se verificar que este parâmetro varia entre 0.7 e 0.85 e portanto os valores são similares a aqueles computados com o modelo de diagnose na seção anterior. Na Figura 6.35 é mostrada a eficiência termodinâmica instantânea da combustão, em função da temperatura dos gases. Também neste caso se verifica a tendência geral de aumento da eficiência com o aumento da temperatura. Na Figura 6.36 são mostradas as exergias termoquímica e química do sistema, durante os processos de combustão e expansão.

Na Figura 6.37 são mostrados os termos do balanço de exergia durante o processo de exaustão. A taxa de variação da exergia do sistema, associada à saída de gases (curva "Esc") segue de perto o formato da curva de vazão através da válvula de escape. O termo associado à produção de trabalho é significativo apenas no início do processo, durante a exaustão espontânea. A taxa de destruição de exergia por irreversibilidades é nula (da mesma forma que durante a compressão) já que o processo é internamente reversível. A Figura 6.38 mostra as exergias termoquímica e química durante a exaustão. Observa-se que durante todo este processo, a exergia do sistema diminui em virtude da saída de gases através da válvula. Entretanto, pela Figura 6.39

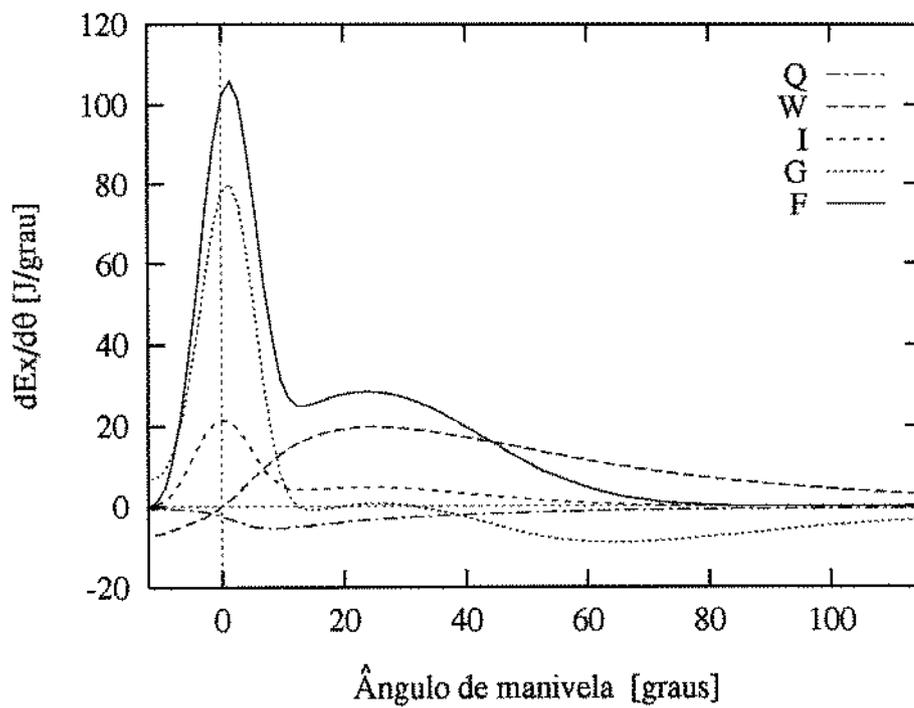


Figura 6.33: Os termos do balanço de exergia durante os processos de combustão e expansão.

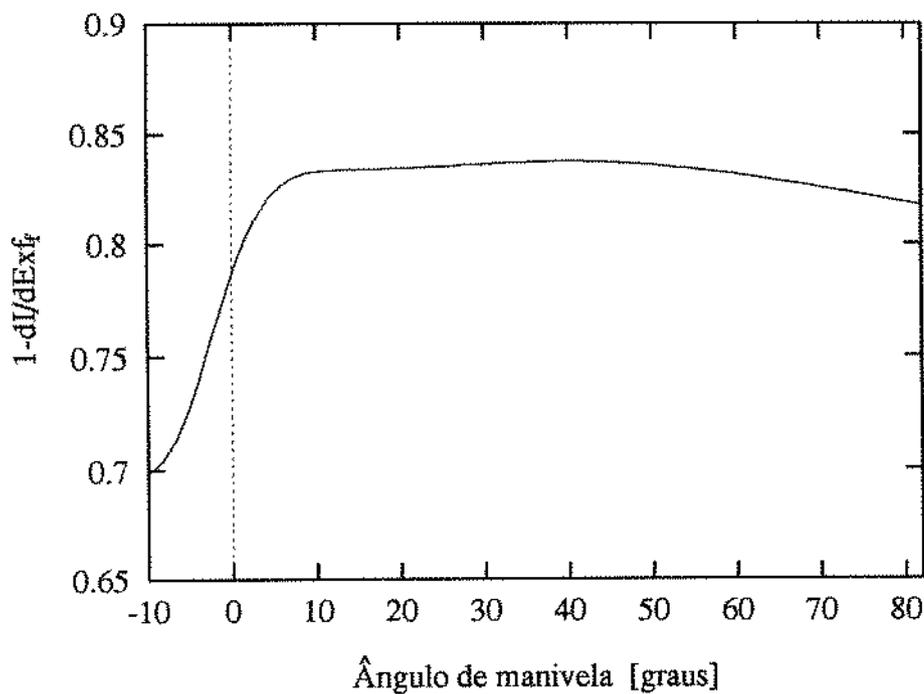


Figura 6.34: A eficiência termodinâmica instantânea da combustão.

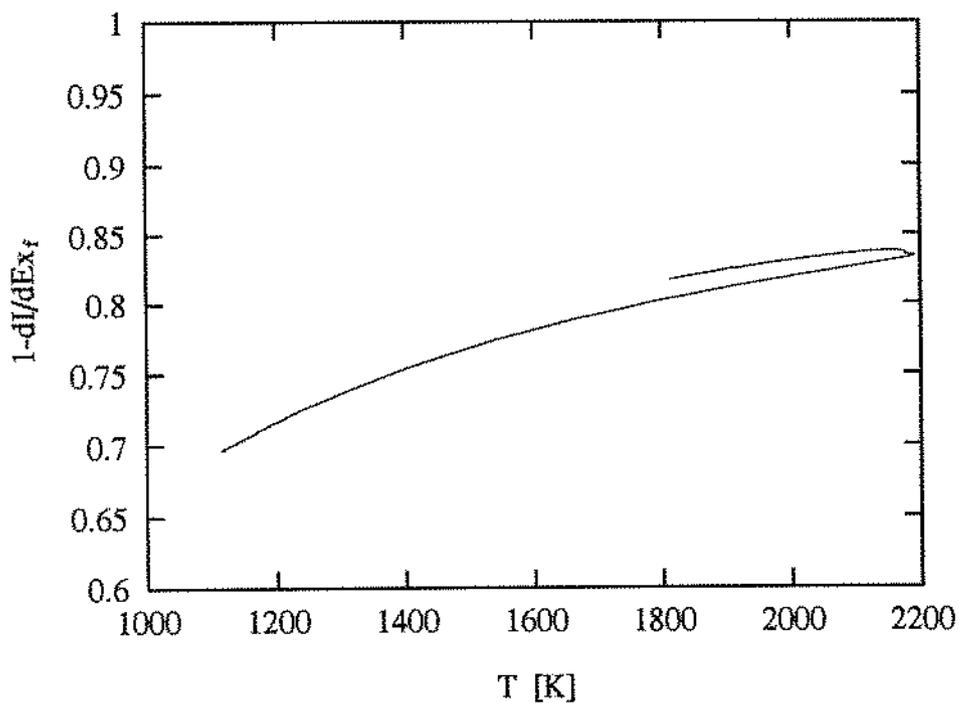


Figura 6.35: A eficiência termodinâmica instantânea da combustão em função da temperatura.

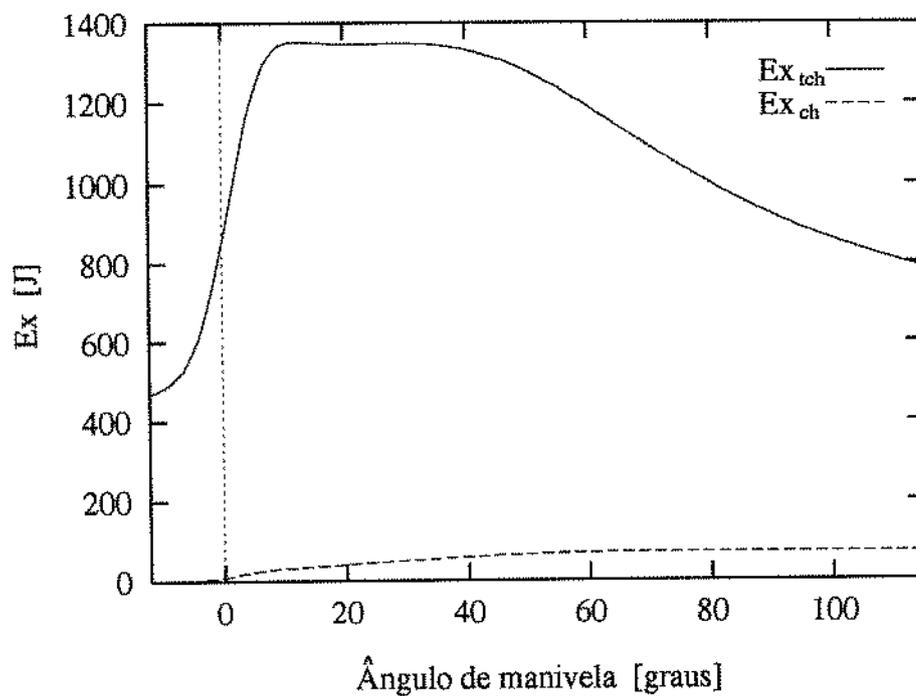


Figura 6.36: As exergias termoquímica e química durante os processos de combustão e expansão.

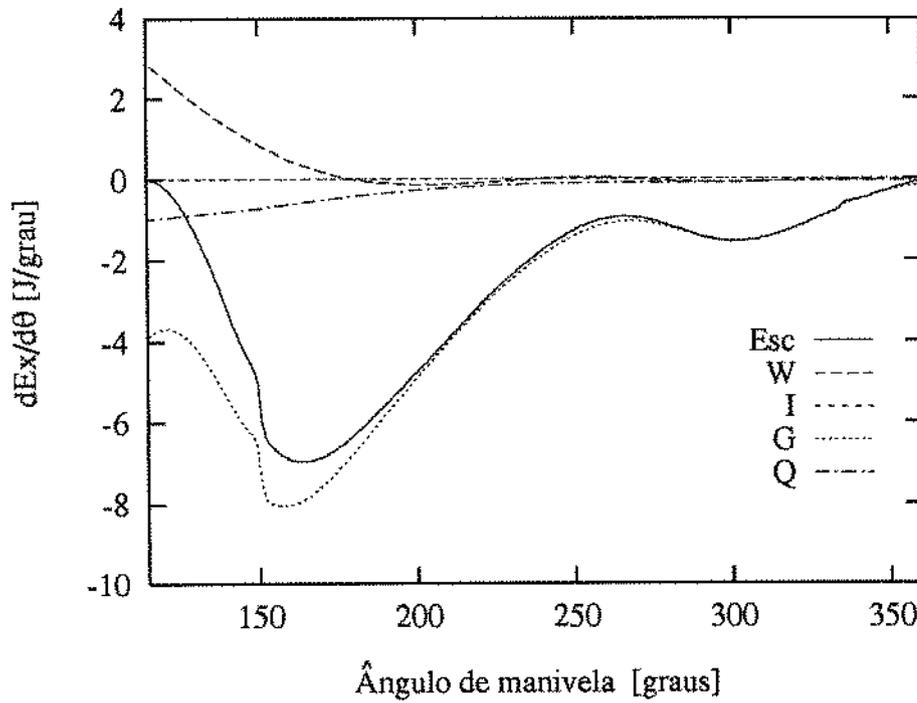


Figura 6.37: Os termos do balanço de exergia durante o processo de exaustão.

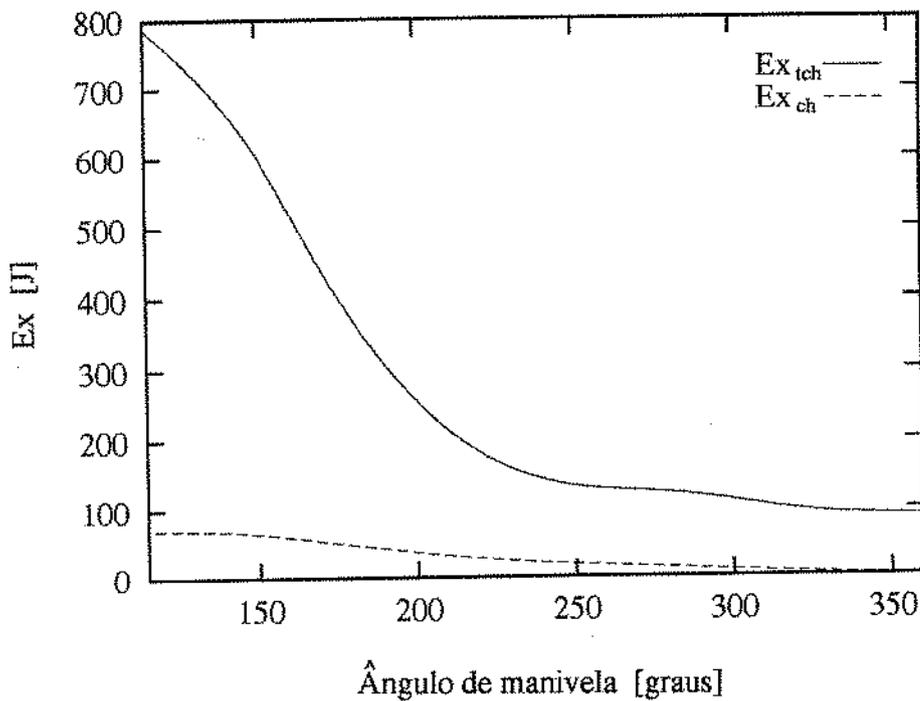


Figura 6.38: As exergias termoquímica e química durante a exaustão.

pode-se ver que durante a exaustão forçada (entre 180 e 360 graus do ângulo de manivela) a exergia por unidade de massa do sistema aumenta. Isto deve-se a que durante a exaustão forçada, se realiza trabalho de compressão sobre os gases no cilindro.

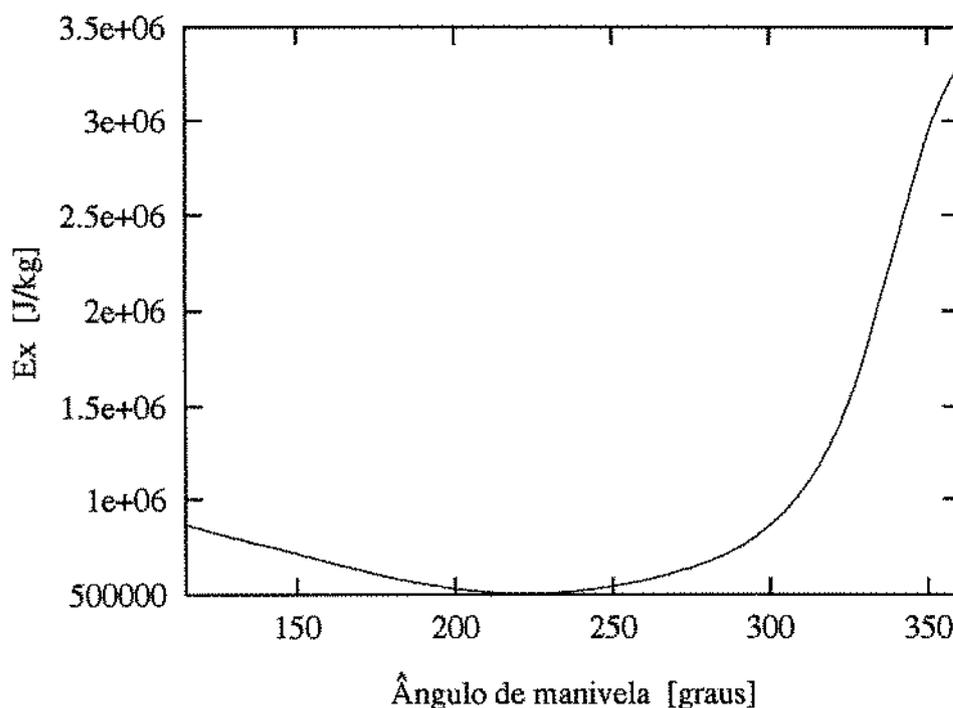


Figura 6.39: A exergia total por unidade de massa durante a exaustão.

As Tabelas 6.3 e 6.4 mostram respectivamente os resultados dos balanços de energia e exergia no volume de controle, durante um ciclo de trabalho.

Tabela 6.3: Resultados do balanço de energia por ciclo.

Calor transmitido às paredes do cilindro [J]	355.56
Trabalho realizado pelos gases [J]	870.05
Entalpia (absoluta) que entra através da valvula de admissão [J]	267.12
Entalpia (absoluta) que sai através da valvula de escape [J]	-968.28
Entalpia (absoluta) que entra com o combustível [J]	-0.01

Para uma melhor compreensão dos resultados do balanço de energia, é conveniente expressar estes valores em termos percentuais, referidos ao conteúdo energético da massa de combustível introduzida no cilindro, calculado a partir do poder calorífico inferior do combustível. Da mesma forma, o balanço de exergia pode ser expresso em termos percentuais em relação à exergia que ingressa no volume de controle com o combustível e com os gases admitidos. Estes resultados são mostrados na Tabela 6.5. Um resultado clássico pode ser observado

Tabela 6.4: Resultados do balanço de exergia por ciclo.

Exergia transmitida com o calor às paredes do cilindro [J]	306.63
Exergia do trabalho realizado pelos gases [J]	870.04
Exergia que entra através da valvula de admissão [J]	45.17
Exergia que sai através da valvula de escape [J]	635.68
Exergia que entra com o combustível [J]	2253.34
Exergia destruída por irreversibilidades [J]	484.29

nesta tabela — o balanço de energia mostra que 41.93% da energia fornecida ao sistema é rejeitada com os gases de escape, o que poderia levar à conclusão que aproveitando-se de alguma forma esta energia, poderia duplicar-se a eficiência do motor. Entretanto, o balanço de exergia mostra que a parcela de exergia contida nos gases de exaustão corresponde a 27.66% da exergia fornecida ao sistema. Assim, o ganho que pode ser obtido é bem menor que o sugerido pela análise de Primeira Lei.

Tabela 6.5: Valores percentuais da distribuição de energia e exergia.

	Energia	Exergia
Calor transmitido às paredes do cilindro	16.85	13.33
Trabalho realizado pelos gases	41.22	37.85
Gases de exaustão	41.93	27.66
Destruição por irreversibilidades		21.07

A Tabela 6.6 mostra alguns resultados globais do ciclo para o caso simulado.

Tabela 6.6: Resultados globais da simulação.

Eficiência volumétrica	0.828
Pressão média indicada [bar]	9.212
Potência indicada [KW]	23.20
Eficiência térmica	41.22
Eficiência de Segunda Lei	38.61

Capítulo 7

Conclusões

Neste trabalho, dois modelos de simulação de motores de ciclo diesel tem sido construídos. O primeiro deles — o modelo de diagnose — permite analisar a evolução do processo de combustão de um motor real, para o qual se dispõe do diagrama de pressão determinado experimentalmente. O segundo modelo — o modelo preditivo — permite simular o ciclo completo do motor, quando a taxa de queima de combustível é especificada.

Em ambos os modelos, são consideradas as hipóteses de equilíbrio químico e homogeneidade da mistura de gases contidos no cilindro, o que limita seu uso nos casos quando se deseja avaliar a formação de substâncias poluentes. Entretanto, os modelos são apropriados para determinar os índices de eficiência e desempenho do motor, e para realizar extensivos estudos paramétricos destinados à otimização desses índices.

Uma vez que o modelo preditivo permite levar em conta os efeitos de propagação de ondas nos dutos, é possível avaliar a influência de parâmetros relacionados à configuração geométrica dos sistemas de admissão e escape (área da seção transversal, variação desta área ao longo do duto, comprimento dos dutos, etc.), sobre parâmetros tais como a eficiência volumétrica e a fração de gases residuais. Este modelo permite também otimizar a sintonia entre os intervalos de abertura das válvulas e a geometria dos sistemas de admissão e escape.

Em ambos os modelos está incluída a análise exergética dos processos que ocorrem no cilindro do motor. Dada a forma como foi definido o volume de controle, esta análise exergética permite distinguir entre as variações da exergia do sistema devido à destruição por irreversibilidades internas, e aquelas associadas à transferência de calor, à realização de trabalho, e aos fluxos de massa através das válvulas e do bico injetor. Como era esperado diante das hipóteses adotadas, os resultados obtidos no Capítulo 6 mostram que apenas os processos de admissão e combustão são internamente irreversíveis. O processo de exaustão também pode apresentar irreversibilidades nos casos em que ocorre escoamento reverso através da válvula de escape.

As irreversibilidades no processo de admissão estão associadas ao estrangulamento do escoamento na seção da válvula e à mistura dos gases de admissão com os gases que se encontram no cilindro (os estados termodinâmicos destes gases são substancialmente diferentes). Estas mesmas causas determinam as irreversibilidades do processo de exaustão nos casos quando ocorre escoamento reverso.

O processo de combustão tem merecido especial atenção uma vez que é onde ocorre a maior parte das irreversibilidades do ciclo. Como foi mencionado no Capítulo 6, em um trabalho prévio onde foram apresentados resultados obtidos com o modelo de diagnose [119], foi observado que a forma de quantificar as irreversibilidades do processo de combustão através da taxa de destruição de exergia, não providencia uma base de comparação que permita levar em conta a quantidade de combustível que está queimando. Na ocasião foi proposto avaliar a irreversibilidade da combustão através da *taxa de destruição de exergia por unidade de massa de combustível queimado*, o que resultou apropriado para os casos quando apenas um único combustível é considerado. Como um parâmetro de maior abrangência, desta vez é definida uma *eficiência termodinâmica instantânea do processo de combustão*, a qual permite fazer análises comparativas de processos de combustão inclusive nos casos em que diversos combustíveis estão sendo considerados. Nos resultados mostrados no Capítulo 6 foram incluídas as curvas de eficiência instantânea da combustão. Para os casos analisados foi verificado que entre 15 e 30% da exergia do combustível é destruída durante a combustão. Foi verificado também, que a eficiência instantânea do processo de combustão tende a aumentar com a temperatura. As curvas que mostram a eficiência instantânea em função da temperatura refletem claramente esta tendência. Esta característica do processo de combustão desperta a curiosidade no sentido de se investigar a interrelação entre a eficiência exergética instantânea da combustão, a temperatura dos gases queimados e a temperatura adiabática de chama da mistura combustível-ar. Esta pesquisa é sugerida para trabalhos futuros.

Referências Bibliográficas

- [1] Kamimoto T. and Kobayashi H. Combustion processes in diesel engines. *Progress in Energy and Combustion Science*, 17:163–189, 1991.
- [2] Borman G. L. Reciprocating engine combustion research needs. *SAE Transactions*, (850398):101–112, 1985.
- [3] Wood C.D. Research needs for diesel engines. *SAE Transactions*, (881178):6.1392–6.1401, 1988.
- [4] Ferguson C. R. *Internal Combustion Engines: Applied Thermosciences*. John Wiley and Sons, 1986.
- [5] Taylor C. F. *The Internal-Combustion Engine in Theory and Practice*, volume 2. The M.I.T. Press, second edition, 1985.
- [6] Jovaj M. S., editor. *Motores de Automóvil*. Editora Mir, Moscú, 1982.
- [7] Hershey R. L., Eberhardt J. E., and Hottel H. C. Thermodynamic properties of the working fluid in internal combustion engines. *SAE Transactions*, pages 409–424, 1936.
- [8] Newhall H. K. and Starkman E. S. Thermodynamic properties of octane and air for engine performance calculations. *SAE paper*, (633 G), 1963.
- [9] Powell H. N. Applications of an enthalpy-fuel/air ratio diagram to “First Law” combustion problems. *Transactions of the ASME*, pages 1129–1138, July 1957.
- [10] Myers P. S. The art of choosing a model. *SAE paper*, (850341), 1985.
- [11] McAulay K.J., Wu T., Chen S. K., Borman G. L., Myers P. S., and Ueyhara O. A. Development and evaluation of the simulation of the compression ignition engine. *SAE paper*, (650451), 1965.
- [12] Krieger R. B. and Borman G. L. The computation of apparent heat release for internal combustion engines. *ASME paper*, (66-WA/DGP-4), 1966.
- [13] Olikara C. and Borman G. L. A computer program for calculating properties of equilibrium combustion products with some applications to I. C. engines. *SAE paper*, (750468), 1975.
- [14] Way R. J. B. Methods for determination of composition and thermodynamic properties of combustion products for internal combustion engine calculations. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 190(60/76):687–697, 1977.

- [15] Lavoie G. A., Heywood J. B., and Keck J. C. Experimental and theoretical study of nitric oxide formation in internal combustion engines. *Combustion Science and Technology*, 1, February 1970.
- [16] Spadaccini L. J. and Chinitz W. An investigation of nonequilibrium effects in an internal combustion engine. *Transactions of the ASME: Journal of Engineering for Power*, pages 98–108, April 1972.
- [17] Yakubowski J. *O Transporte Automotriz e a Defesa do Meio Ambiente*. Transport, Moscou, 1979. Em russo.
- [18] Lipkea W. H. and DeJoode A. D. A model of a direct injection diesel combustion system for use in cycle simulation and optimization studies. *SAE Transactions*, (870573):4.600–4.613, 1987.
- [19] Desantes J. M., Lapuerta M., and Tinaut F. Combustion dans les moteur diesel rapides a injection directe. modele base sur l'interaction entre le jet et le mouvement de l'air dans le cylindre. *Entropie*, (148):51–61, 1989.
- [20] Borman G. L. *Mathematical Simulation of Internal Combustion Engines Processes and Performance Including Comparisons with Experiment*. PhD thesis, Mechanical Engineering Dept., University of Wisconsin, 1964.
- [21] Woschni G. Engine cycle simulation, an effective tool for the development of medium speed diesel engines. *SAE Transactions*, (870570):4.570–4.581, 1987.
- [22] Kumar K., Gaur R. R., Garg R. D., and Babu M. K. G. A thermodynamic simulation model for a four stroke medium speed diesel engine. *SAE paper*, (840516), 1984.
- [23] Zacharias F. Analytical representation of the thermodynamic properties of combustion gases. *SAE paper*, (670930), 1967.
- [24] Hiroyasu H. and Kadota T. Models for combustion and formation of nitric oxide and soot in direct injection diesel engines. *SAE paper*, (760129), 1976.
- [25] Shahed S. M., Chui W. S., and Yumlu V. S. A preliminary model for the formation of nitric oxide in DI diesel engines and its application in parametric studies. *SAE paper*, (730083), 1973.
- [26] Campbell A. S. *Thermodynamic Analysis of Combustion Engines*. Robert E. Krieger Publishing Company, Inc., Malabar, Florida, 1985.
- [27] Stull D. R. and Prophet H. *JANAF Thermochemical Tables*. National Bureau of Standards, Washington, D.C., second edition, 1971.
- [28] Meintjes K. and Morgan A. P. Performance of algorithms for calculating the equilibrium composition of a mixture of gases. *Journal of Computational Physics*, (60):219–234, 1985.

- [29] Gallo W. L. R. *Análise Exergética de Motores a Gasolina e a Álcool*. Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP, Campinas – SP, Brasil, 1991.
- [30] Yeregin E. N. *Fundamentals of Chemical Thermodynamics*. Mir Publishers, Moscow, 1986.
- [31] Ortega W. and Rheinboldt W. *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*. Academic Press, New York, 1970.
- [32] Heywood J. B. Engine combustion modeling — an overview. In Mattavi J. S. and Amann C. A., editors, *Combustion Modelling in Reciprocating Engines*, pages 1–38, New York NY, 1980. Plenum Press.
- [33] Blumberg P. N., Lavoie G. A., and Tabaczynski R. J. Phenomenological models for reciprocating internal combustion engines. *Progress in Energy and Combustion Science*, 5:123–167, 1979.
- [34] Shipinski J., Uyehara O. A., and Myers P. S. Experimental correlation between rate of injection and rate of heat release in a diesel engine. *ASME paper*, (68-DGP-11), 1968.
- [35] Woschni G. and Anisits F. Experimental investigation and mathematical presentation of rate of heat release in diesel engines dependent upon engine operating conditions. *SAE paper*, (740086), 1974.
- [36] Miyamoto N., Chikahisa T., Murayama T., and Sawyer R. Description and analysis of diesel engine rate of combustion and performance using Wiebe's functions. *SAE Transactions*, (850107):1.622–1.633, 1985.
- [37] Timoney D. J. Problems with heat release analysis in DI diesels. *SAE Transactions*, (870270):4.259–4.268, 1987.
- [38] Williams T. J. and Whitehouse N. D. Investigation into some aspects of the computation of diesel engine combustion. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 190(42/76):467–476, 1976.
- [39] Blizard N. C. and Keck J. C. Experimental and theoretical investigation of turbulent burning model for internal combustion engines. *SAE Transactions*, (740191):846–864, 1974.
- [40] Reynolds W. C. Modeling of fluid motions in engines — an introductory overview. In Mattavi J. S. and Amann C. A., editors, *Combustion Modelling in Reciprocating Engines*, pages 41–68, New York NY, 1980. Plenum Press.
- [41] Borman G. L. and Nishiwaki K. Internal combustion engine heat transfer. *Progress in Energy and Combustion Science*, 13:1–46, 1987.
- [42] Petrichenko P. M. *Fundamentos Físicos dos Processos no Cilindro do Motor de Combustão Interna*. I.L.U., Leningrado, 1983. Em russo.

- [43] Petrichenko R. M. and Petrichenko M. R. *Transferência de Calor por Convecção em Máquinas Reciprocantes*. Mashinostroenie, Leningrado, 1979. Em russo.
- [44] Orlin A. C. and Kruglov M. G., editors. *Motores de Combustão Interna: Teoria dos Motores Reciprocantes e de Ciclo Combinado*. Mashinostroenie, Moscou, 1983. Em russo.
- [45] Annand W. J. D. Heat transfer in cylinders of reciprocating internal combustion engines. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 177(36):973-990, 1963.
- [46] Woschni G. A universally applicable equation for the instantaneous heat transfer coefficient in the internal combustion engine. *SAE Transactions*, (670931):3065-3082, 1967.
- [47] Nishiwaki K., Shimamoto Y., and Miyake K. Average heat transfer coefficients on a cylinder wall in the intake and exhaust processes of motoring test. *Bulletin of the Japan Society of Mechanical Engineers*, 22(174):1796-1809, 1979.
- [48] Morel T., Rackmil C. I., Keribar R., and Jennings M. J. Model for heat transfer in spark ignited engines. In *Fluid Flow and Heat Transfer in Reciprocating Machinery. Presented at The Winner Annual Meeting of the American Society of Mechanical Engineers*, Boston, Massachusetts, December 1987.
- [49] Rao V. K. and Bardon M. F. Convective heat transfer in reciprocating engines. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 199(D3):221-226, 1985.
- [50] Chernishev G. D., Khatchian A. S., and Pikus V. I. *Processos de Trabalho e Carga Térmica em Motores Diesel*. Mashinostroenie, Moscou, 1986. Em russo.
- [51] Lyn W. T. Calculations of the effect of rate of heat release on the shape of cylinder-pressure diagram and cycle efficiency. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers: Automobile Division*, (1):34-46, 1960-61.
- [52] Austen A. E. W. and Lyn W. T. Relation between fuel injection and heat release in a direct-injection engine and the nature of the combustion process. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers: Automobile Division*, (1):47-62, 1960-61.
- [53] Alcock J. F. and Scott W. M. Some more light on diesel combustion. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers: Automobile Division*, (5):179-200, 1962-63.

- [54] Lyn W. T. and Valdmanis E. The effects of physical factors on ignition delay. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 181 Part 2A(1):34-59, 1966-67.
- [55] Semenov N. N. *Reações em Cadeia*. Goskhimtexizdat, 1934. Em russo.
- [56] Wiebe I. I. *Recentes Avanços Sobre os Ciclos de Trabalho dos Motores*. Mashizdat, Moscou, 1962. Em russo.
- [57] Watson N., Pilley A. D., and Marzouk M. A combustion correlation for diesel engine simulation. *SAE paper*, (800029), 1980.
- [58] Kestin J. Availability: The concept and associated terminology. *Energy*, 5:679-692, 1980.
- [59] Sussman M.V. Steady flow availability and the standard chemical availability. *Energy*, 5:793-802, 1980.
- [60] Szargut J. International progress in Second Law analysis. *Energy*, 5:709-718, 1980.
- [61] McGovern J. A. Exergy analysis – a different perspective on energy. Part 1: The concept of exergy. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 204(A4):253-262, 1990.
- [62] van Gool W. Demystification of the exergy concept. In Valero A. and Tsatsaronis G., editors, *Proceedings of the International Symposium ECOS'92 on Efficiency, Costs, Optimization and Simulation of Energy Systems*, pages 27-32, Saragoza, 1992. The American Society of Mechanical Engineers.
- [63] Hevert H. W. Second Law analysis: An alternative indicator of system efficiency. *Energy*, 5:865-873, 1980.
- [64] McGovern J. A. Exergy analysis – a different perspective on energy. Part 2: Rational efficiency and some examples of exergy analysis. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 204(A4):263-268, 1990.
- [65] Gallo W. L. R. and Milanez L. F. Eficiência exergetica: Conceitos e aplicações. In *Anais do III Encontro Nacional de Ciências Térmicas*, pages 1045-1050, Itapema, SC, Dezembro 1990.
- [66] Shao Y. An approach for calculating exergy efficiency of complex processes. In Valero A. and Tsatsaronis G., editors, *Proceedings of the International Symposium ECOS'92 on Efficiency, Costs, Optimization and Simulation of Energy Systems*, pages 81-84, Saragoza, 1992. The American Society of Mechanical Engineers.

- [67] Sorin M. V., Le Goff P., and Brodyanskii V. M. Thermodynamic optimization and integration of processes using a general formula for efficiency. In Valero A. and Tsatsaronis G., editors, *Proceedings of the International Symposium ECOS'92 on Efficiency, Costs, Optimization and Simulation of Energy Systems*, pages 211–222, Saragoza, 1992. The American Society of Mechanical Engineers.
- [68] Gallo W. L. R. and Milanez L. F. Choice of a reference state for exergetic analysis. *Energy*, 15:113–121, 1990.
- [69] Flynn P. F., Hoag K. L., Kamel M. M., and Primus R. J. A new perspective on diesel engine evaluation based on Second Law analysis. *SAE paper*, (840032), 1984.
- [70] Primus R. J. A Second Law approach to exhaust system optimization. *SAE paper*, (840033), 1984.
- [71] Primus R. J., Flynn P.f., and Brands M. C. An appraisal of advanced engine concepts using Second Law analysis techniques. *SAE paper*, (841287), 1984.
- [72] Primus R. J. and Flynn P. F. The assessment of losses in diesel engines using Second Law analysis. In *Analysis and Design of Advanced Energy Systems: Computer Aided Analysis and Design*, volume 2-3, pages 61–68, New York, NY, 1987. The American Society of Mechanical Engineers – Advanced Energy Systems Division.
- [73] McKinley T. L. and Primus R. J. An assessment of turbocharging systems for diesel engines from First and Second Law perspectives. *SAE Transactions*, (880598):6.1061–6.1071, 1988.
- [74] Van Gerpen J. H. and Shapiro H. N. Second Law analysis of diesel engine combustion. In *Analysis and Design of Advanced Energy Systems: Computer Aided Analysis and Design*, volume 3-3, pages 53–65, New York, NY, 1987. The American Society of Mechanical Engineers – Advanced Energy Systems Division.
- [75] Shapiro H. N. and Van Gerpen J. H. Two zone combustion models for Second Law analysis of internal combustion engines. *SAE Transactions*, (890823):1408–1422, 1989.
- [76] Lipkea W. H. and DeJooode A. D. A comparison of the performance of two direct injection diesel engines from a Second Law perspective. *SAE Transactions*, (890824):1423–1440, 1989.
- [77] Zellat M. Application de l'analyse exergetique à l'étude thermodynamique des cycles de fonctionnement des moteurs diesel. *Entropie*, (134):78–87, 1987.

- [78] Alkidas A. C. The application of availability and energy balances to a diesel engine. *Transactions of the ASME: Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 110:462–469, 1988.
- [79] Lior N. and Rudy G. J. Second Law analysis of an ideal otto cycle. In *Second Law Analysis of Heat Transfer in Energy Systems*, pages 39–47. The American Society of Mechanical Engineers, 1987. ASME HTD 80.
- [80] Gallo W. L. R. and Milanez L. F. Exergetic analysis of ethanol and gasoline fueled engines. *SAE paper*, (920809), 1992.
- [81] Moran M. J. *Availability Analysis: A Guide to Efficient Energy Use*. Prentice-Hall Inc., New Jersey, 1982.
- [82] Kruglov M. G. and Mednov A. A. *Dinâmica dos Gases nos Motores de Combustão Interna Turboalimentados*. Mashinostroenie, Moscou, 1988. Em russo.
- [83] Horlock J. H. and Winterbone D. E., editors. *The Thermodynamics and Gas Dynamics of Internal Combustion Engines*, volume 2, chapter 17. Clarendon Press, Oxford, 1986.
- [84] Wallace F. J. Performance of two stroke compression ignition engines in combination with compressors and turbines. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, (177):43–63, 1963.
- [85] Wallace F. J. and Cave P. R. A general approach to the computer solution of combustion engine mass flow and power matching analysis. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 187:535–546, 1973.
- [86] Horlock J. H. and Winterbone D. E., editors. *The Thermodynamics and Gas Dynamics of Internal Combustion Engines*, volume 2, chapter 18. Clarendon Press, Oxford, 1986.
- [87] Benson R. S. *The Thermodynamics and Gas Dynamics of Internal Combustion Engines*, volume 1. Clarendon Press, Oxford, 1982.
- [88] Horlock J. H. and Winterbone D. E., editors. *The Thermodynamics and Gas Dynamics of Internal Combustion Engines*, volume 2, chapter 19. Clarendon Press, Oxford, 1986.
- [89] Jenny E. Unidimensional transient flow, with considerations of friction, heat transfer and change of sections. *Brown Boveri Review*, (57):447–461, 1950.
- [90] Rousseau J. K. Modèles numériques. traitement du cas d'un moteur 4 temps par la méthode des caractéristiques: Comparaison experience-calcul pour un monocylindre. *Ingenieurs de l'Automobile*, 48(4):247–252, 1974.

- [91] Trenc F. Cálculo gráfico-numérico dos escoamentos não estacionários nos motores de combustão interna usando o método das características. *Strojniški Vestnik*, 22(11-12):305-312, 1976. Traduzido do esloveno para o russo pela Biblioteca Técnica Central de Moscou.
- [92] Benson R. S., Garg R. D., and Woollatt D. A numerical solution of unsteady flow problems. *International Journal of Mechanical Science*, 6:117-144, 1964.
- [93] Benson R. S. Numerical solution of one-dimensional non-steady flow with supersonic and subsonic flow and heat transfer. *International Journal of Mechanical Science*, 14:635-642, 1972.
- [94] Benson R. S., Annand W. J. D., and Baruah P. C. A simulation model including intake and exhaust systems for a single cylinder four-stroke cycle spark ignition engine. *International Journal of Mechanical Science*, 17:77-124, 1975.
- [95] Benson R. S., Baruah P. C., and Whelan B. Simulation model for a crankcase-compression two-stroke spark-ignition engine including intake and exhaust systems. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 189:167-175, 1975.
- [96] Winterbone D. E., Nichols J. R., and Alexander G. I. Efficiency of the manifolds of turbocharged engines. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 199(D2):137-149, 1985.
- [97] Seifert H. Die berechnung instationärer stromungsvorgänge in den rohrlitungs-systemen von mehrzylinder-motoren. *Motorterrhnische Zeitschrift*, 33(11):421-428, 1972.
- [98] Melcher K. Ein reibungsmodell zur berechnung von instationären stromungen in rohrlitungen an brennkraftmaschinen. *Bosch Technische Berichte*, 5(7):273-290, 1974.
- [99] Azuma T., Tokunaga Y., and Yura T. Characteristics of exhaust gas pulsation of constant pressure turbo-charged diesel engines. *Journal of Engineering for Power*, 102:827-835, October 1980.
- [100] Yano R. A. and James L. H. Computer program for evaluating reciprocating engine airflow and exhaust stack performance. *SAE paper*, (830150), 1983.
- [101] Payri F., Desantes J. M., and Corberan J. M. Parametres pour la caracterisation du processus de renouvellement de la charge dans un moteur alternatif a combustion interne. *Entropie*, (148):35-40, 1989.
- [102] Benson R. S. and Baruah P. C. Non-steady flow through a gauze in a duct. *International Journal of Mechanical Science*, 7(4):449-, 1965.

- [103] Benson R. S. and El Shafie H. M. F. Non-steady flow through a square-edged orifice in a pipe. *International Journal of Mechanical Science*, 7(4):483-, 1965.
- [104] Jeffrey A. *Quasilinear Hyperbolic Systems and Waves*. The Pitman Press, Bath, 1976.
- [105] Godunov S. K. *Ecuaciones de la Física Matemática*. Editorial Mir, Moscú, 1984.
- [106] Smith G. D. *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Oxford University Press, New York, 1985.
- [107] W. F. Ames. *Non Linear Partial Differential Equations in Engineering*. Academic Press, 1965.
- [108] Benson R. S., Garg R. D., and Woods W. A. Unsteady flow in pipes with gradual or sudden area changes. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 178:1-23, 1963-64.
- [109] Kostrov A. V. and Kolpakov A. M. Transferência de calor dos gases de exaustão às paredes do coletor. *Avtomobilnaya Promishlennost*, (10):5-8, 1978. Em russo.
- [110] Caton J. A. and Heywood J. B. An experimental and analytical study of heat transfer in an exhaust port. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 24(4):581-595, 1981.
- [111] Kreith F. *Principles of Heat Transfer*. Intext Educational Publishers, New York, 1973.
- [112] Shapiro A. H. *The Dynamics and Thermodynamics of Compressible Fluid Flow*. The Ronald Press, 1954.
- [113] White F. M. *Viscous Fluid Flow*. Mc Graw Hill, 1974.
- [114] Gureyev A. A. and Kamfer G. M. *Volatilidade dos Combustíveis para Motores de Combustão Interna*. Khimia, Moscou, 1982. Em russo.
- [115] Szargut J. and Styrylska T. Angenaherte bestimmung der exergie von brennstoffen. *Brennstoff-Warme-Kraft*, 16(12):589-596, 1964. Apud: Kotas T. J. *The Exergy Method of Thermal Plant Analysis*. Butterworths, London, 1985.
- [116] Payri F., Boada F., and Macián V. Reduction of pumping losses by the use of a variable valve timing system. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 198 D(15), 1985.
- [117] Payri F., Corberán J. M., and Boada F. Modifications to the method of characteristics for the analysis of the gas exchange process in internal combustion engines. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 200(D4):259-266, 1986.

- [118] Zhabin V. N., Korsi E. K., Nikitin C. E., Khatchian A. C., and Tcherniak B. Ya. Indicações metodológicas para trabalhos experimentais com motores de combustão interna. Technical report, Instituto de Automóveis e Rodovias de Moscou, Moscou, 1980. Em russo.
- [119] Velásquez J. A. and Milanez L. F. Avaliação do processo de combustão em motores diesel usando análise de segunda lei. In *Anais do III Encontro Nacional de Ciências Térmicas*, pages 1051–1056, Itapema, SC, Dezembro 1990.
- [120] Orlin A. C. and Kruglov M. G., editors. *Motores de Combustão Interna: Projeto e Cálculo Estrutural dos Motores Reciprocantes e de Ciclo Combinado*. Mashinostroenie, Moscou, 1984. Em russo.
- [121] Laforgia D. and Ficarella A. Poppet valve flow characteristics in internal combustion engines. In *12d. Annual Energy Sources Technology Conference and Exhibition. The Internal Combustion Engine Division, ASME. Basic Processes in Internal Combustion Engines.*, pages 33–43. The American Society of Mechanical Engineers, 1989.
- [122] Kastner M. A., Williams T. J., and White J. B. Poppet inlet valve characteristics and their influence on the induction process. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 178, Pt. 1(36):955–978, 1963–64.
- [123] Sherman R. H. and Blumberg P. N. The influence of induction and exhaust processes on emissions and fuel consumption in the spark ignition engine. *SAE Transactions*, (770880):3025–3040, 1977.

Apêndice A

Equações Para o Cálculo das Frações Molares e suas Derivadas

A.1 Cálculo das Frações Molares.

$$\sqrt{x_4} = \frac{\sqrt{(C_1 + C_5\sqrt{x_8})^2 + 8m'x_{13}(1 + C_9\sqrt{x_8})} - (C_1 + C_5\sqrt{x_8})}{4(1 + C_9\sqrt{x_8})}$$

$$x_6 = \frac{n'x_{13}}{1 + C_{10}\sqrt{x_8}}$$

$$\sqrt{x_{11}} = \sqrt{\frac{1}{16}(C_3 + C_7\sqrt{x_8})^2 + r'x_{13}} - \frac{C_3 + C_7\sqrt{x_8}}{4}$$

$$\frac{\partial\sqrt{x_4}}{\partial x_8} = \frac{(C_1 + C_5\sqrt{x_8})\frac{C_5}{\sqrt{x_8}} + 4m'x_{13}\frac{C_9}{\sqrt{x_8}}}{8(1 + C_9\sqrt{x_8})\sqrt{(C_1 + C_5\sqrt{x_8})^2 + 8m'x_{13}(1 + C_9\sqrt{x_8})}}$$
$$\frac{C_5 + 4C_9\sqrt{x_4}}{8(1 + C_9\sqrt{x_8})\sqrt{x_8}}$$

$$\frac{\partial\sqrt{x_4}}{\partial x_{13}} = \frac{m'}{\sqrt{(C_1 + C_5\sqrt{x_8})^2 + 8m'x_{13}(1 + C_9\sqrt{x_8})}}$$

$$\frac{\partial x_6}{\partial x_8} = -\frac{x_6}{1 + C_{10}\sqrt{x_8}} \frac{C_{10}}{2\sqrt{x_8}}$$

$$\frac{\partial x_6}{\partial x_{13}} = \frac{x_6}{x_{13}}$$

$$\frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial x_8} = \frac{\frac{1}{32} (C_3 + C_7 \sqrt{x_8}) \frac{C_7}{\sqrt{x_8}}}{\sqrt{\frac{1}{16} (C_3 + C_7 \sqrt{x_8})^2 + r' x_{13}}} - \frac{1}{8} \frac{C_7}{\sqrt{x_8}}$$

$$\frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial x_{13}} = \frac{0.5 r'}{\sqrt{\frac{1}{16} (C_3 + C_7 \sqrt{x_8})^2 + r' x_{13}}}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial x_8} &= \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial x_8} \sqrt{x_8} (C_5 + 2C_9 \sqrt{x_4}) + \frac{\partial x_6}{\partial x_8} (1 + 2C_{10} \sqrt{x_8}) + \\ &\frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial x_8} C_7 \sqrt{x_8} + \frac{1}{2\sqrt{x_8}} (C_2 + C_5 \sqrt{x_4} + C_7 \sqrt{x_{11}} + \\ &C_9 x_4 + 2C_{10} x_6) + 2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial x_{13}} &= \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial x_{13}} \sqrt{x_8} (C_5 + 2C_9 \sqrt{x_4}) + \frac{\partial x_6}{\partial x_{13}} (1 + 2C_{10} \sqrt{x_8}) + \\ &\frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial x_{13}} C_7 \sqrt{x_8} - 2r \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_2}{\partial x_8} &= \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial x_8} (C_1 + C_5 \sqrt{x_8} + 2\sqrt{x_4} + 2C_9 \sqrt{x_4} \sqrt{x_8}) + \\ &\frac{\partial x_6}{\partial x_8} (1 + C_{10} \sqrt{x_8}) + \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial x_8} (C_3 + C_7 \sqrt{x_8} + 2\sqrt{x_{11}}) + \\ &\frac{1}{2\sqrt{x_8}} (C_2 + C_5 \sqrt{x_4} + C_7 \sqrt{x_{11}} + C_9 x_4 + C_{10} x_6) + 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_2}{\partial x_{13}} &= \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial x_{13}} (C_1 + C_5 \sqrt{x_8} + 2\sqrt{x_4} + 2C_9 \sqrt{x_4} \sqrt{x_8}) + \\ &\frac{\partial x_6}{\partial x_{13}} (1 + C_{10} \sqrt{x_8}) + \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial x_{13}} (C_3 + C_7 \sqrt{x_8} + 2\sqrt{x_{11}}) + r'' \end{aligned}$$

$$x_1 = C_1 \sqrt{x_4}$$

$$x_2 = C_2 \sqrt{x_8}$$

$$x_3 = C_3 \sqrt{x_{11}}$$

$$x_5 = C_5 \sqrt{x_4} \sqrt{x_8}$$

$$x_7 = C_7 \sqrt{x_{11}} \sqrt{x_8}$$

$$x_9 = C_9 x_4 \sqrt{x_8}$$

$$x_{10} = C_{10} x_6 \sqrt{x_8}$$

$$x_{12} = r'' x_{13}$$

A.2 Cálculo das Derivadas das Frações Molares.

$$\left(\frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial T} \right)_{x_8, x_{13}} = \frac{0.25 (C_1 + C_5 \sqrt{x_8}) \left(\frac{\partial C_1}{\partial T} + \frac{\partial C_5}{\partial T} \sqrt{x_8} \right) + m' x_{13} \frac{\partial C_9}{\partial T} \sqrt{x_8}}{(1 + C_9 \sqrt{x_8}) \sqrt{(C_1 + C_5 \sqrt{x_8})^2 + 8m' x_{13} (1 + C_9 \sqrt{x_8})}} \\ - \frac{\frac{\partial C_1}{\partial T} + \frac{\partial C_5}{\partial T} \sqrt{x_8} + 4 \frac{\partial C_9}{\partial T} \sqrt{x_4} \sqrt{x_8}}{4 (1 + C_9 \sqrt{x_8})}$$

$$\left(\frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial p} \right)_{x_8, x_{13}} = \frac{0.25 (C_1 + C_5 \sqrt{x_8}) \frac{\partial C_1}{\partial p} + m' x_{13} \sqrt{x_8} \frac{\partial C_9}{\partial p}}{(1 + C_9 \sqrt{x_8}) \sqrt{(C_1 + C_5 \sqrt{x_8})^2 + 8m' x_{13} (1 + C_9 \sqrt{x_8})}} \\ - \frac{\frac{\partial C_1}{\partial p} + 4 \frac{\partial C_9}{\partial p} \sqrt{x_4} \sqrt{x_8}}{4 (1 + C_9 \sqrt{x_8})}$$

$$\left(\frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial \phi} \right)_{x_8, x_{13}} = \frac{x_{13} \frac{dm'}{d\phi}}{\sqrt{(C_1 + C_5 \sqrt{x_8})^2 + 8m' x_{13} (1 + C_9 \sqrt{x_8})}}$$

$$\left(\frac{\partial x_6}{\partial T} \right)_{x_8, x_{13}} = \frac{x_6 \sqrt{x_8}}{1 + C_{10} \sqrt{x_8}} \frac{\partial C_{10}}{\partial T}$$

$$\left(\frac{\partial x_6}{\partial p} \right)_{x_8, x_{13}} = \frac{x_6 \sqrt{x_8}}{1 + C_{10} \sqrt{x_8}} \frac{\partial C_{10}}{\partial p}$$

$$\left(\frac{\partial x_6}{\partial \phi} \right)_{x_8, x_{13}} = \frac{x_6}{n'} \frac{\partial n'}{\partial \phi}$$

$$\left(\frac{\partial\sqrt{x_{11}}}{\partial T}\right)_{x_8, x_{13}} = \frac{\frac{1}{16}(C_3 + C_7\sqrt{x_8})\left(\frac{\partial C_3}{\partial T} + \sqrt{x_8}\frac{\partial C_7}{\partial T}\right)}{\sqrt{\frac{1}{16}(C_3 + C_7\sqrt{x_8})^2 + r'x_{13}}}$$

$$\frac{1}{4}\left(\frac{\partial C_3}{\partial T} + \frac{\partial C_7}{\partial T}\sqrt{x_8}\right)$$

$$\left(\frac{\partial\sqrt{x_{11}}}{\partial p}\right)_{x_8, x_{13}} = \frac{\frac{1}{16}(C_3 + C_7\sqrt{x_8})\frac{\partial C_3}{\partial p}}{\sqrt{\frac{1}{16}(C_3 + C_7\sqrt{x_8})^2 + r'x_{13}}} - \frac{1}{4}\frac{\partial C_3}{\partial p}$$

$$\left(\frac{\partial\sqrt{x_{11}}}{\partial\phi}\right)_{x_8, x_{13}} = \frac{0.5 x_{13} \frac{\partial r'}{\partial\phi}}{\sqrt{\frac{1}{16}(C_3 + C_7\sqrt{x_8})^2 + r'x_{13}}}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial T} &= \sqrt{x_8}(C_5 + 2C_9\sqrt{x_4})\left(\frac{\partial\sqrt{x_4}}{\partial T}\right)_{x_8, x_{13}} + \\ &(1 + 2C_{10}\sqrt{x_8})\left(\frac{\partial x_6}{\partial T}\right)_{x_8, x_{13}} + C_7\sqrt{x_8}\left(\frac{\partial\sqrt{x_{11}}}{\partial T}\right)_{x_8, x_{13}} + \\ &\sqrt{x_8}\left(\frac{\partial C_2}{\partial T} + \frac{\partial C_5}{\partial T}\sqrt{x_4} + \frac{\partial C_7}{\partial T}\sqrt{x_{11}} + \frac{\partial C_9}{\partial T}x_4 + 2\frac{\partial C_{10}}{\partial T}x_6\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial p} &= \sqrt{x_8}(C_5 + 2C_9\sqrt{x_4})\left(\frac{\partial\sqrt{x_4}}{\partial p}\right)_{x_8, x_{13}} + \\ &(1 + 2C_{10}\sqrt{x_8})\left(\frac{\partial x_6}{\partial p}\right)_{x_8, x_{13}} + C_7\sqrt{x_8}\left(\frac{\partial\sqrt{x_{11}}}{\partial p}\right)_{x_8, x_{13}} + \\ &\sqrt{x_8}\left(\frac{\partial C_2}{\partial p} + \frac{\partial C_9}{\partial p}x_4 + 2\frac{\partial C_{10}}{\partial p}x_6\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial\phi} &= \sqrt{x_8}(C_5 + 2C_9\sqrt{x_4})\left(\frac{\partial\sqrt{x_4}}{\partial\phi}\right)_{x_8, x_{13}} + \\ &(1 + 2C_{10}\sqrt{x_8})\left(\frac{\partial x_6}{\partial\phi}\right)_{x_8, x_{13}} + C_7\sqrt{x_8}\left(\frac{\partial\sqrt{x_{11}}}{\partial\phi}\right)_{x_8, x_{13}} - \\ &2x_{13}\frac{\partial r}{\partial\phi} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial T} = (C_1 + C_5\sqrt{x_8} + 2\sqrt{x_4} + 2C_9\sqrt{x_4}\sqrt{x_8})\left(\frac{\partial\sqrt{x_4}}{\partial T}\right)_{x_8, x_{13}} +$$

$$\begin{aligned}
& (1 + C_{10}\sqrt{x_8}) \left(\frac{\partial x_6}{\partial T} \right)_{x_8, x_{13}} + \\
& (C_3 + C_7\sqrt{x_8} + 2\sqrt{x_{11}}) \left(\frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial T} \right)_{x_8, x_{13}} + \\
& \frac{\partial C_1}{\partial T} \sqrt{x_4} + \frac{\partial C_2}{\partial T} \sqrt{x_8} + \frac{\partial C_3}{\partial T} \sqrt{x_{11}} + \frac{\partial C_5}{\partial T} \sqrt{x_4} \sqrt{x_8} + \\
& \frac{\partial C_7}{\partial T} \sqrt{x_{11}} \sqrt{x_8} + \frac{\partial C_9}{\partial T} x_4 \sqrt{x_8} + \frac{\partial C_{10}}{\partial T} x_6 \sqrt{x_8} \\
\frac{\partial f_2}{\partial p} = & (C_1 + C_5\sqrt{x_8} + 2\sqrt{x_4} + 2C_9\sqrt{x_4}\sqrt{x_8}) \left(\frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial p} \right)_{x_8, x_{13}} + \\
& (1 + C_{10}\sqrt{x_8}) \left(\frac{\partial x_6}{\partial p} \right)_{x_8, x_{13}} + \\
& (C_3 + C_7\sqrt{x_8} + 2\sqrt{x_{11}}) \left(\frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial p} \right)_{x_8, x_{13}} + \\
& \frac{\partial C_1}{\partial p} \sqrt{x_4} + \frac{\partial C_2}{\partial p} \sqrt{x_8} + \frac{\partial C_3}{\partial p} \sqrt{x_{11}} + \frac{\partial C_9}{\partial p} x_4 \sqrt{x_8} + \\
& \frac{\partial C_{10}}{\partial p} x_6 \sqrt{x_8} \\
\frac{\partial f_2}{\partial \phi} = & (C_1 + C_5\sqrt{x_8} + 2\sqrt{x_4} + 2C_9\sqrt{x_4}\sqrt{x_8}) \left(\frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial \phi} \right)_{x_8, x_{13}} + \\
& (1 + C_{10}\sqrt{x_8}) \left(\frac{\partial x_6}{\partial \phi} \right)_{x_8, x_{13}} + \\
& (C_3 + C_7\sqrt{x_8} + 2\sqrt{x_{11}}) \left(\frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial \phi} \right)_{x_8, x_{13}} + x_{13} \frac{\partial r''}{\partial \phi} \\
\frac{\partial C_1}{\partial T} = & \left(\frac{p}{p_0} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{dK_{p1}}{dT} \\
\frac{\partial C_2}{\partial T} = & \left(\frac{p}{p_0} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{dK_{p2}}{dT} \\
\frac{\partial C_3}{\partial T} = & \left(\frac{p}{p_0} \right)^{-\frac{1}{2}} \frac{dK_{p3}}{dT} \\
\frac{\partial C_5}{\partial T} = & \frac{dK_{p5}}{dT}
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial C_7}{\partial T} = \frac{dK_{p7}}{dT}$$

$$\frac{\partial C_9}{\partial T} = \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{dK_{p9}}{dT}$$

$$\frac{\partial C_{10}}{\partial T} = \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{dK_{p10}}{dT}$$

$$\frac{dK_{p1}}{dT} = \frac{K_{p1}}{RT^2} \left(\bar{h}_1(T) - \frac{1}{2} \bar{h}_4(T) \right)$$

$$\frac{dK_{p2}}{dT} = \frac{K_{p2}}{RT^2} \left(\bar{h}_2(T) - \frac{1}{2} \bar{h}_8(T) \right)$$

$$\frac{dK_{p3}}{dT} = \frac{K_{p3}}{RT^2} \left(\bar{h}_3(T) - \frac{1}{2} \bar{h}_{11}(T) \right)$$

$$\frac{dK_{p5}}{dT} = \frac{K_{p5}}{RT^2} \left(\bar{h}_5(T) - \frac{1}{2} \bar{h}_4(T) - \frac{1}{2} \bar{h}_8(T) \right)$$

$$\frac{dK_{p7}}{dT} = \frac{K_{p7}}{RT^2} \left(\bar{h}_7(T) - \frac{1}{2} \bar{h}_8(T) - \frac{1}{2} \bar{h}_{11}(T) \right)$$

$$\frac{dK_{p9}}{dT} = \frac{K_{p9}}{RT^2} \left(\bar{h}_9(T) - \bar{h}_4(T) - \frac{1}{2} \bar{h}_8(T) \right)$$

$$\frac{dK_{p10}}{dT} = \frac{K_{p10}}{RT^2} \left(\bar{h}_{10}(T) - \bar{h}_6(T) - \frac{1}{2} \bar{h}_8(T) \right)$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial p} = -\frac{1}{2p} C_1$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial p} = -\frac{1}{2p} C_2$$

$$\frac{\partial C_3}{\partial p} = -\frac{1}{2p} C_3$$

$$\frac{\partial C_9}{\partial p} = \frac{1}{2p} C_9$$

$$\frac{\partial C_{10}}{\partial p} = \frac{1}{2p} C_{10}$$

$$\frac{\partial n'}{\partial \phi} = -\beta \frac{r_0}{\phi}$$

$$\frac{\partial m'}{\partial \phi} = -2\gamma \frac{r_0}{\phi}$$

$$\frac{\partial r}{\partial \phi} = -(1 + \beta + 0.5\gamma) \frac{r_0}{\phi}$$

$$\frac{\partial r'}{\partial \phi} = -\alpha \frac{r_0}{\phi}$$

$$\frac{\partial r''}{\partial \phi} = -\delta \frac{r_0}{\phi}$$

$$\frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial T} = \frac{1}{2\sqrt{x_8}} \frac{\partial x_8}{\partial T}$$

$$\frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial T} = \left(\frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial T} \right)_{x_8, x_{13}} + \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial T} + \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial x_{13}} \frac{\partial x_{13}}{\partial T}$$

$$\frac{\partial x_6}{\partial T} = \left(\frac{\partial x_6}{\partial T} \right)_{x_8, x_{13}} + \frac{\partial x_6}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial T} + \frac{\partial x_6}{\partial x_{13}} \frac{\partial x_{13}}{\partial T}$$

$$\frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial T} = \left(\frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial T} \right)_{x_8, x_{13}} + \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial T} + \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial x_{13}} \frac{\partial x_{13}}{\partial T}$$

$$\frac{\partial x_1}{\partial T} = \frac{\partial C_1}{\partial T} \sqrt{x_4} + C_1 \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial T}$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial T} = \frac{\partial C_2}{\partial T} \sqrt{x_8} + C_2 \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial T}$$

$$\frac{\partial x_3}{\partial T} = \frac{\partial C_3}{\partial T} \sqrt{x_{11}} + C_3 \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial T}$$

$$\frac{\partial x_4}{\partial T} = 2\sqrt{x_4} \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial T}$$

$$\frac{\partial x_5}{\partial T} = \frac{\partial C_5}{\partial T} \sqrt{x_4} \sqrt{x_8} + C_5 \sqrt{x_8} \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial T} + C_5 \sqrt{x_4} \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial T}$$

$$\frac{\partial x_7}{\partial T} = \frac{\partial C_7}{\partial T} \sqrt{x_{11}} \sqrt{x_8} + C_7 \sqrt{x_8} \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial T} + C_7 \sqrt{x_{11}} \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial T}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_9}{\partial T} &= \frac{\partial C_9}{\partial T} x_4 \sqrt{x_8} + C_9 \sqrt{x_8} \frac{\partial x_4}{\partial T} + C_9 x_4 \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial T} \\ \frac{\partial x_{10}}{\partial T} &= \frac{\partial C_{10}}{\partial T} x_6 \sqrt{x_8} + C_{10} \sqrt{x_8} \frac{\partial x_6}{\partial T} + C_{10} x_6 \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial T} \\ \frac{\partial x_{11}}{\partial T} &= 2\sqrt{x_{11}} \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial T} \\ \frac{\partial x_{12}}{\partial T} &= r'' \frac{\partial x_{13}}{\partial T} \\ \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial p} &= \frac{1}{2\sqrt{x_8}} \frac{\partial x_8}{\partial p} \\ \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial p} &= \left(\frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial p} \right)_{x_8, x_{13}} + \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial p} + \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial x_{13}} \frac{\partial x_{13}}{\partial p} \\ \frac{\partial x_6}{\partial p} &= \left(\frac{\partial x_6}{\partial p} \right)_{x_8, x_{13}} + \frac{\partial x_6}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial p} + \frac{\partial x_6}{\partial x_{13}} \frac{\partial x_{13}}{\partial p} \\ \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial p} &= \left(\frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial p} \right)_{x_8, x_{13}} + \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial p} + \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial x_{13}} \frac{\partial x_{13}}{\partial p} \\ \frac{\partial x_1}{\partial p} &= \frac{\partial C_1}{\partial p} \sqrt{x_4} + C_1 \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial p} \\ \frac{\partial x_2}{\partial p} &= \frac{\partial C_2}{\partial p} \sqrt{x_8} + C_2 \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial p} \\ \frac{\partial x_3}{\partial p} &= \frac{\partial C_3}{\partial p} \sqrt{x_{11}} + C_3 \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial p} \\ \frac{\partial x_4}{\partial p} &= 2\sqrt{x_4} \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial p} \\ \frac{\partial x_5}{\partial p} &= C_5 \sqrt{x_8} \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial p} + C_5 \sqrt{x_4} \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial p} \\ \frac{\partial x_7}{\partial p} &= C_7 \sqrt{x_8} \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial p} + C_7 \sqrt{x_{11}} \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial p} \\ \frac{\partial x_9}{\partial p} &= \frac{\partial C_9}{\partial p} x_4 \sqrt{x_8} + C_9 \sqrt{x_8} \frac{\partial x_4}{\partial p} + C_9 x_4 \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial p} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_{10}}{\partial p} &= \frac{\partial C_{10}}{\partial p} x_6 \sqrt{x_8} + C_{10} \sqrt{x_8} \frac{\partial x_6}{\partial p} + C_{10} x_6 \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial p} \\ \frac{\partial x_{11}}{\partial p} &= 2\sqrt{x_{11}} \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial p} \\ \frac{\partial x_{12}}{\partial p} &= r'' \frac{\partial x_{13}}{\partial p} \\ \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial \phi} &= \frac{1}{2\sqrt{x_8}} \frac{\partial x_8}{\partial \phi} \\ \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial \phi} &= \left(\frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial \phi} \right)_{x_8, x_{13}} + \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial \phi} + \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial x_{13}} \frac{\partial x_{13}}{\partial \phi} \\ \frac{\partial x_6}{\partial \phi} &= \left(\frac{\partial x_6}{\partial \phi} \right)_{x_8, x_{13}} + \frac{\partial x_6}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial \phi} + \frac{\partial x_6}{\partial x_{13}} \frac{\partial x_{13}}{\partial \phi} \\ \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial \phi} &= \left(\frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial \phi} \right)_{x_8, x_{13}} + \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial \phi} + \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial x_{13}} \frac{\partial x_{13}}{\partial \phi} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \phi} &= C_1 \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial \phi} \\ \frac{\partial x_2}{\partial \phi} &= C_2 \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial \phi} \\ \frac{\partial x_3}{\partial \phi} &= C_3 \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial \phi} \\ \frac{\partial x_4}{\partial \phi} &= 2\sqrt{x_4} \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial \phi} \\ \frac{\partial x_5}{\partial \phi} &= C_5 \sqrt{x_8} \frac{\partial \sqrt{x_4}}{\partial \phi} + C_5 \sqrt{x_4} \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial \phi} \\ \frac{\partial x_7}{\partial \phi} &= C_7 \sqrt{x_8} \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial \phi} + C_7 \sqrt{x_{11}} \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial \phi} \\ \frac{\partial x_9}{\partial \phi} &= C_9 \sqrt{x_8} \frac{\partial x_4}{\partial \phi} + C_9 x_4 \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial \phi} \\ \frac{\partial x_{10}}{\partial \phi} &= C_{10} \sqrt{x_8} \frac{\partial x_6}{\partial \phi} + C_{10} x_6 \frac{\partial \sqrt{x_8}}{\partial \phi} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial x_{11}}{\partial \phi} = 2\sqrt{x_{11}} \frac{\partial \sqrt{x_{11}}}{\partial \phi}$$

$$\frac{\partial x_{12}}{\partial \phi} = r'' \frac{\partial x_{13}}{\partial \phi} + x_{13} \frac{\partial r''}{\partial \phi}$$

Os ângulos de manivela correspondentes às posições do ponto morto superior (PMS) e ponto morto inferior (PMI), são determinados a partir das seguintes relações

$$\begin{aligned}\sin \theta_{PMS} &= \frac{e}{l+r} \\ \sin(\theta_{PMI} - 180^\circ) &= \frac{e}{l-r}\end{aligned}$$

O afastamento instantâneo do pistão em relação ao ponto morto superior (x) é uma função do ângulo de manivela (θ). A equação que correlaciona x e θ pode ser deduzida considerando-se que x é a diferença entre os segmentos \overline{PQ} e \overline{BQ} da Figura B.1. Assim,

$$x = \overline{PQ} - \overline{BQ}$$

onde

$$\begin{aligned}\overline{PQ} &= \sqrt{(l+r)^2 - e^2} \\ \overline{BQ} &= \overline{BD} + \overline{OC} \\ \overline{BD} &= l \cos \beta \\ \overline{OC} &= r \cos \theta\end{aligned}$$

A relação entre β e θ pode ser determinada a partir das seguintes expressões

$$\begin{aligned}\overline{AD} &= l \sin \beta \\ \overline{AD} &= r \sin \theta - e\end{aligned}$$

de onde resulta

$$\cos \beta = \sqrt{1 - \frac{1}{l^2}(r \sin \theta - e)^2}$$

Assim, o deslocamento do pistão a partir do PMS é dado pela seguinte equação

$$x = \sqrt{(l+r)^2 - e^2} - r \cos \theta - \sqrt{l^2 - (r \sin \theta - e)^2}$$

Quando $\theta = \theta_{PMI}$, o deslocamento é igual ao curso do pistão (S_p). Assim obtém-se

$$S_p = \sqrt{(l+r)^2 - e^2} + r \sqrt{1 - \left(\frac{e}{l-r}\right)^2} - \sqrt{l^2 - e^2 \left(\frac{2r-l}{l-r}\right)^2}$$

B.2 Volume do Cilindro.

O volume instantâneo do cilindro (V_c) pode ser determinado pela seguinte expressão

$$V_c = V_{cc} + \frac{\pi D_c^2}{4} x$$

onde V_{cc} é o volume da câmara de combustão e D_c é o diâmetro do cilindro.

O volume deslocado pelo pistão V_h é calculado da seguinte maneira

$$V_h = \frac{\pi D_c^2}{4} S_p$$

O volume da câmara de combustão e o volume deslocado pelo pistão estão relacionados pela seguinte expressão

$$V_{cc} = \frac{V_h}{\varepsilon - 1}$$

onde ε , é a taxa de compressão do motor. Assim, o volume do cilindro pode ser determinado pela seguinte equação

$$V_c = \frac{\pi D_c^2}{4} \left(\frac{S_p}{\varepsilon - 1} + x \right)$$

B.3 Área Lateral do Cilindro.

Para se avaliar a transferência de calor entre o fluido de trabalho e as paredes do cilindro é necessário conhecer a área da superfície lateral do cilindro. Esta área varia com a posição do pistão e conseqüentemente é uma função do ângulo de manivela. No modelo desenvolvido, a seguinte equação é utilizada para se calcular a área lateral do cilindro

$$A_c = A_{cPMS} + \pi D_c x$$

onde A_{cPMS} é a área lateral do cilindro quando o pistão se encontra no ponto morto superior.

Apêndice C

Determinação da Área Mínima de Escoamento na Válvula.

Para se resolver as equações que governam o escoamento nos dutos de admissão e escape, é preciso que sejam especificadas as condições de contorno tanto no extremo livre do duto como no extremo da válvula. No caso do extremo da válvula, as equações que expressam estas condições de contorno foram deduzidas na Seção 4.6 utilizando-se o modelo de pressão constante. Para a aplicação destas equações é preciso que seja determinada a área de garganta do escoamento A_g . Neste trabalho, a estratégia adotada para se calcular A_g baseia-se nos resultados obtidos por Laforgia e Ficarella [121]. Para caracterizar a área mínima do escoamento na válvula, esses autores utilizaram o *coeficiente de redução da área transversal*, o qual é definido como a relação entre a área mínima do escoamento e a área geométrica mínima A_{geo} . Assim,

$$C_S = \frac{A_g}{A_{geo}}$$

Os experimentos realizados por Laforgia e Ficarella mostraram que a relação de pressões à montante e à jusante da válvula exercem uma influência desprezível sobre o coeficiente C_S . Além disso, a partir do trabalho de Kastner *et alii* [122] que mostra que o *coeficiente de descarga* (C_D) obtido para o caso de escoamento não estacionário é essencialmente o mesmo que para o caso de escoamento estacionário, Laforgia e Ficarella concluíram que o coeficiente de redução de área deve exibir esse mesmo comportamento, uma vez que tanto C_S como C_D representam uma medida de quanto o escoamento real se afasta do isentrópico associado e, embora definidos de maneira distinta, esses coeficientes assumem valores muito próximos, podendo substituir um o outro sem incorrer em erros significativos na modelagem [121]. Assim sendo, o coeficiente de redução de área deve ser função apenas da geometria da válvula e da elevação instantânea da mesma. Entretanto, Laforgia e Ficarella encontraram que para o caso de escoamento saindo do duto, a curva de variação do coeficiente C_S muda muito pouco de uma válvula para outra, quando C_S é expresso em função da elevação adimensional y/y_{lim} , onde y_{lim} é a elevação correspondente à situação limite

quando as superfícies cônicas da sede e da válvula ainda se encontram frente a frente. É nesta observação que reside a importância do trabalho [121] pois dela se infere que é possível utilizar uma única correlação para C_S , que seja aplicável para válvulas de diferente geometria. Na Figura C.1 é mostrada a variação de C_S em função da elevação adimensional y/y_{lim} , como proposta em [121].

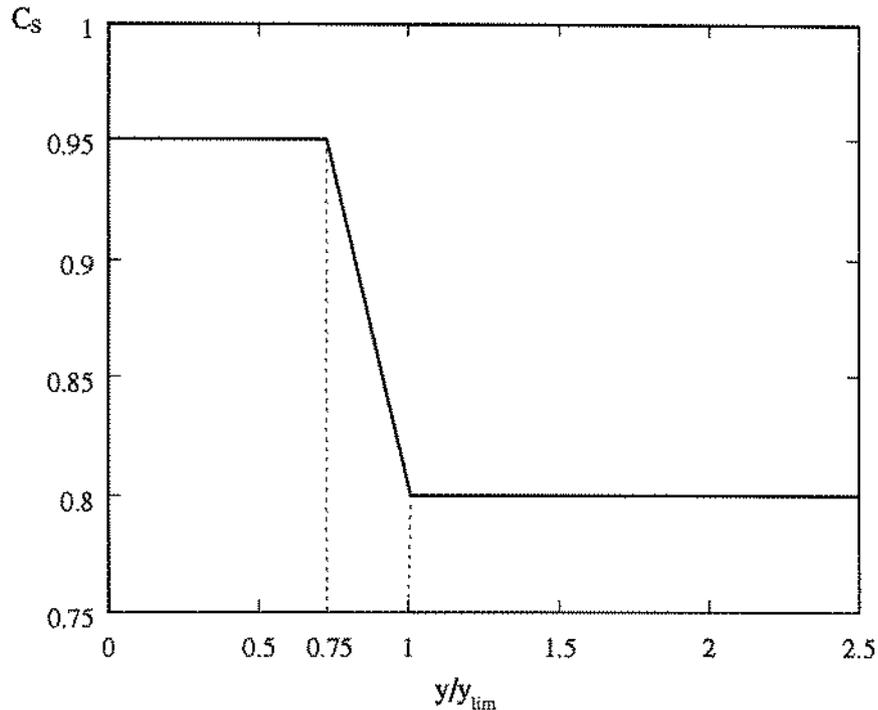


Figura C.1: Coeficiente de redução da área transversal em função da elevação adimensional.

Para o caso de escoamento entrando no duto, Laforgia e Ficarella recomendam, baseando-se nos resultados experimentais por eles obtidos, que o valor de C_S seja escolhido na faixa 0.60–0.65, o que mostra que se trata de um escoamento menos dirigido que no caso de saída do duto.

No modelo desenvolvido, a geometria da válvula é caracterizada pelas dimensões mostradas na Figura C.2.

A posição da válvula correspondente ao limite quando as superfícies cônicas do assento e da válvula ainda se encontram frente a frente é mostrada na Figura C.3. Esta elevação é determinada pela seguinte equação

$$y_{lim} = \frac{d_{se} - d_{vi}}{\sin 2\alpha}$$

A localização da seção de área mínima varia de acordo com a elevação instantânea da válvula. Para elevações menores que y_{lim} , esta seção é determinada pelo segmento que passa pela borda interna da válvula e é perpendicular à superfície cônica do assento (seção A_1 na Figura C.4). A área A_1 é calculada

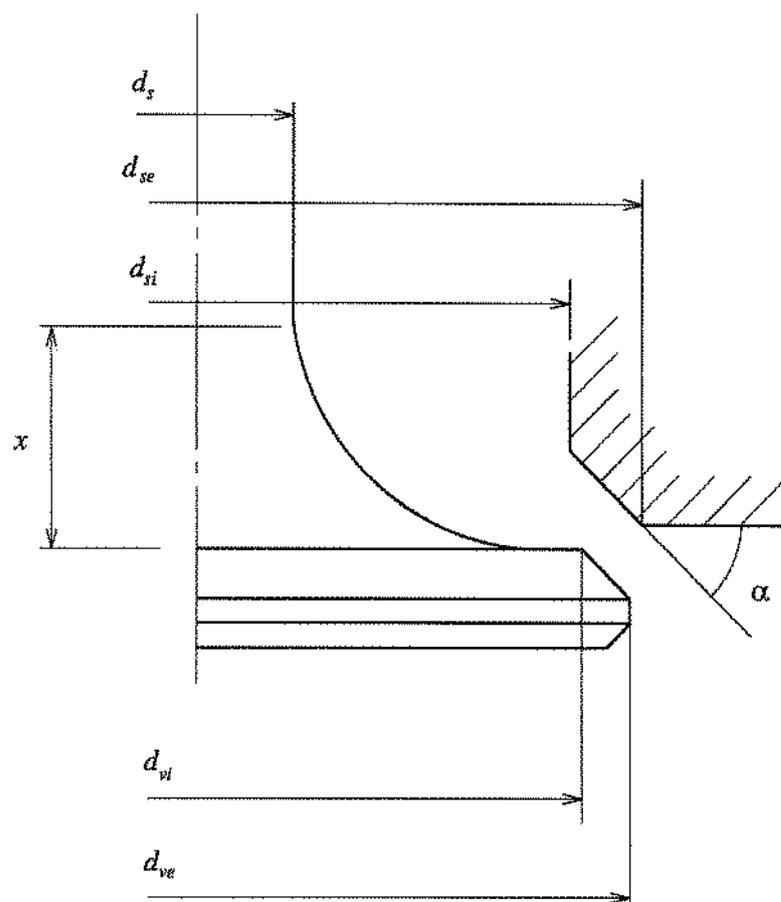


Figura C.2: Geometria da válvula.

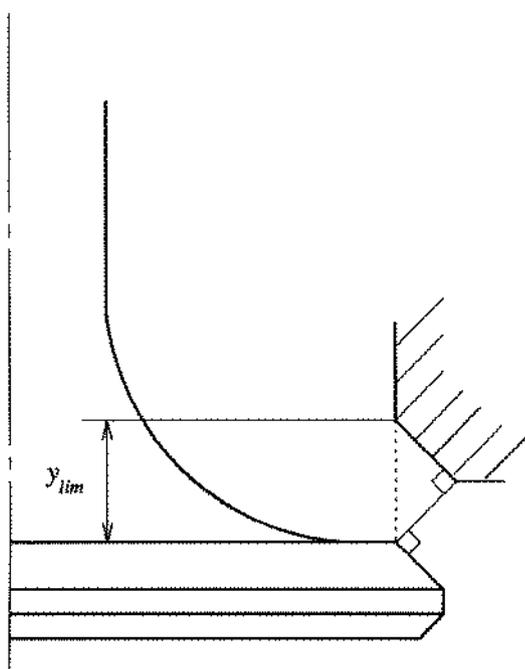


Figura C.3: Posição da válvula correspondente à elevação y_{lim} .

pela seguinte equação

$$A_1 = \pi y \cos \alpha (d_{vi} + y \cos \alpha \sin \alpha)$$

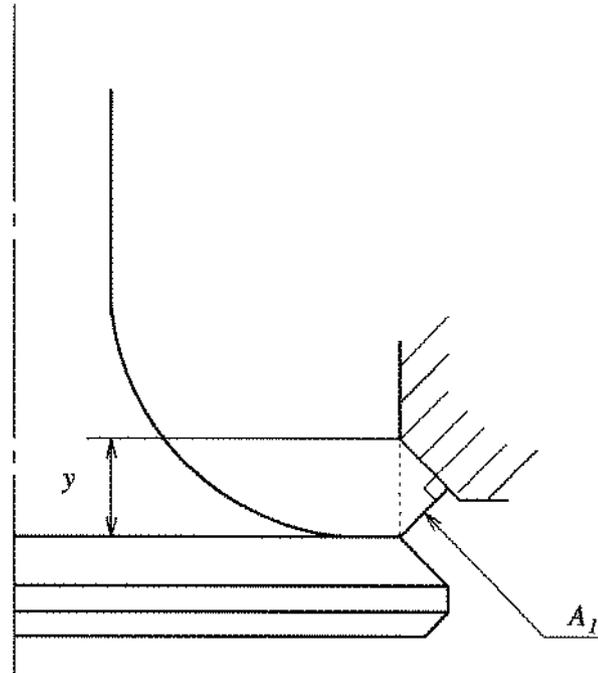


Figura C.4: Localização da seção de área mínima para elevações menores que y_{lim} .

Quando a elevação é maior que y_{lim} , Laforgia e Ficarella consideram que a seção de área mínima se localiza entre a borda interna do assento e a superfície toroidal que une a superfície cônica da válvula à haste (seção A_2 na Figura C.5). No caso limite, quando a elevação da válvula é muito grande, a área geométrica mínima é determinada pela área do anel formado entre a borda interna do assento e a haste (seção A_3 na Figura C.5). A área das seções A_2 e A_3 é calculada pelas seguintes expressões

$$A_3 = \pi \frac{d_{si}^2 - d_s^2}{4}$$

$$A_2 = \frac{\pi}{2} (d_{si} + d_s + 2\overline{AC}) \sqrt{\overline{DE}^2 + \overline{DB}^2}$$

onde

$$\overline{AC} = r(1 - \cos \gamma)$$

$$\overline{DB} = y - \frac{d_{si} - d_{vi}}{2} \tan \alpha - x + r \sin \gamma$$

$$\overline{DE} = \frac{d_{si}}{2} - \overline{AC} - \frac{d_s}{2}$$

$$r = \frac{(d_{vi} - d_s)^2 + 4x^2}{4(d_{vi} - d_s)}$$

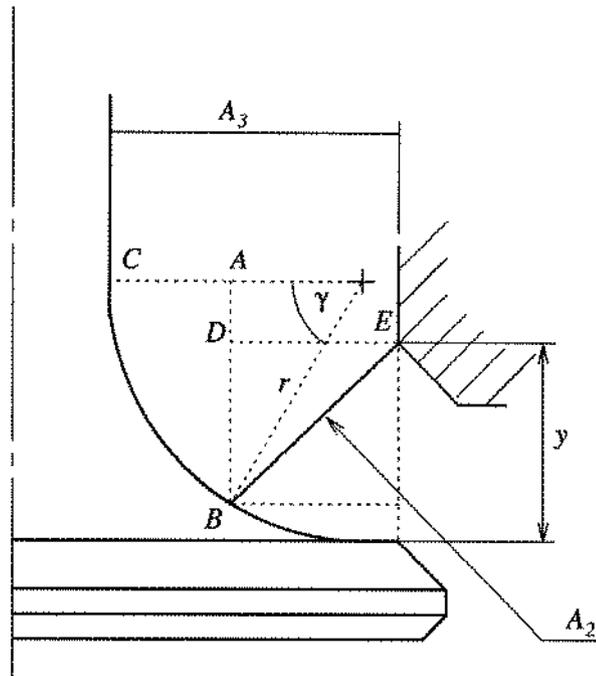


Figura C.5: Localização da seção de área mínima para elevações maiores que y_{lim} segundo Laforgia.

Kastner *et alii* [122] consideram que quando a elevação da válvula é maior que y_{lim} , a seção de área mínima é aquela definida pelo segmento que une a borda externa do assento com a borda interna da válvula (seção A_{2a} na Figura C.6). Para grandes elevações, esses autores também levam em conta a área da seção A_3 . A área da seção A_{2a} é dada pela seguinte equação

$$A_{2a} = \frac{\pi}{2} (d_{se} + d_{vi}) \sqrt{\overline{AD}^2 + \overline{BD}^2}$$

onde

$$\overline{AD} = y - \frac{d_{se} - d_{vi}}{2} \tan \alpha$$

$$\overline{BD} = \frac{d_{se} - d_{vi}}{2}$$

De um ponto de vista rigoroso, em nenhum dos trabalhos citados foram consideradas todas as possíveis localizações da seção de área mínima. Assim sendo, a seção de área geométrica mínima pode não ser aquela que os autores desses trabalhos definiram. Com um propósito meramente ilustrativo, esta área foi calculada levando-se em conta a possibilidade de a seção de área mínima se situar entre a superfície cônica da sede e a superfície toroidal da válvula. Esta é a seção A_{2b} mostrada na Figura C.7. A área desta seção foi determinada pela seguinte expressão

$$A_{2b} = \frac{\pi}{2} (d_E + d_s + 2AC') \sqrt{\overline{DE'}^2 + \overline{DB'}^2}$$

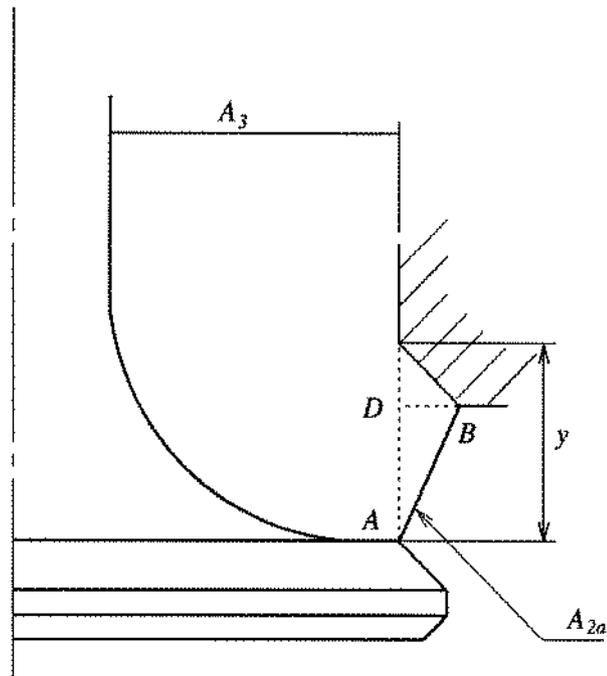


Figura C.6: Localização da seção de área mínima para elevações maiores que y_{lim} segundo Kastner.

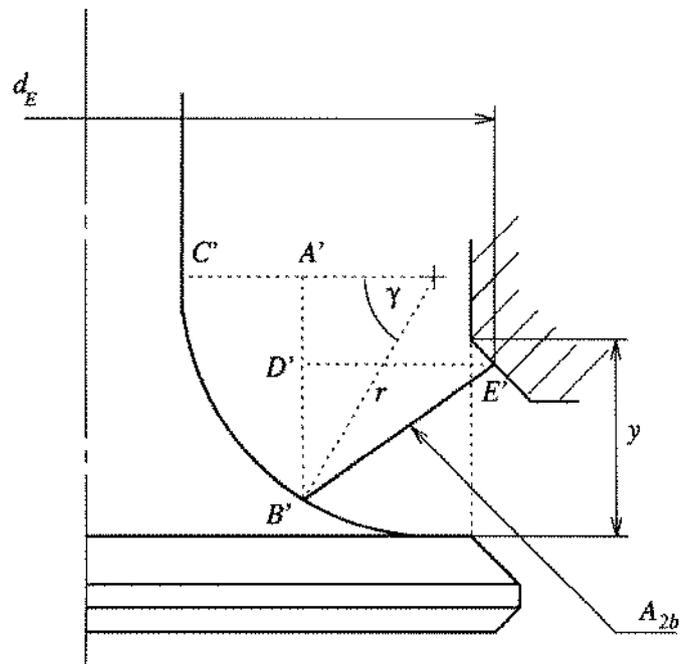


Figura C.7: Localização da seção A_{2b} .

onde

$$\begin{aligned}\overline{AC'} &= r(1 - \cos \gamma) \\ \overline{DB'} &= y - \frac{d_E - d_{vi}}{2} \tan \alpha - x + r \sin \gamma \\ \overline{DE'} &= \frac{d_E}{2} - \overline{AC'} - \frac{d_s}{2} \\ r &= \frac{(d_{vi} - d_s)^2 + 4x^2}{4(d_{vi} - d_s)}\end{aligned}$$

Os cálculos foram feitos para a geometria de válvula chamada de *tipo 1* na referência [122], a mesma que na referência [121] recebeu a denominação *tipo 4*. As dimensões desta válvula correspondem aos dados reportados em [121], os quais são mostrados na Tabela C.1.

Tabela C.1: Dimensões da válvula.

Diâmetro interno da válvula	d_{vi}	25.4 mm
Diâmetro interno da sede	d_{vi}	25.4 mm
Diâmetro externo da sede	d_{se}	27.6 mm
Diâmetro da haste	d_s	6.3 mm
Altura do ponto de tangencia	x	12.7 mm
Ângulo de assento	α	45°

Os resultados obtidos são mostrados na Figura C.8, onde é possível observar que a área mínima como calculada por Laforgia apresenta uma discontinuidade em $y/y_{lim} = 1$ e resulta visivelmente sobre-dimensionada na faixa $1 < y/y_{lim} < 2.7$. Já a área mínima calculada da forma proposta por Kastner, inicialmente adota valores muito próximos daqueles computados levando-se em conta a seção A_{2b} , porém, a partir de $y/y_{lim} \approx 1.7$, as diferenças se tornam consideráveis. Deve ser notado que na curva obtida adotando-se a proposta de Kastner, a área A_3 resulta sendo a menor já a partir de $y/y_{lim} \approx 3.0$, enquanto que nas outras curvas isto ainda não acontece no domínio da figura.

Em princípio, tanto o coeficiente de descarga como o coeficiente de redução de área do escoamento são definidos em função da área geométrica mínima visando caracterizar as irreversibilidades produzidas no escoamento independentemente da geometria do dispositivo que gerou estas irreversibilidades. Isto permite que sejam feitas comparações de coeficientes de descarga ou de coeficientes de redução de área entre válvulas e bocais de diferentes formatos geométricos. O fato de não se utilizar a área geométrica mínima, como aparentemente ocorreu nos trabalhos citados, impede que os valores obtidos possam ser utilizados para comparações com dispositivos de geometria diferente. Além disso, se não se tem consciência que a área utilizada não corresponde à mínima geométrica, pode-se incorrer em erros de interpretação dos fenômenos físicos envolvidos. Entretanto, nada impede que os valores dos coeficientes obtidos tanto por Kastner *et alli* como por Laforgia e Ficarella sejam tratados apenas

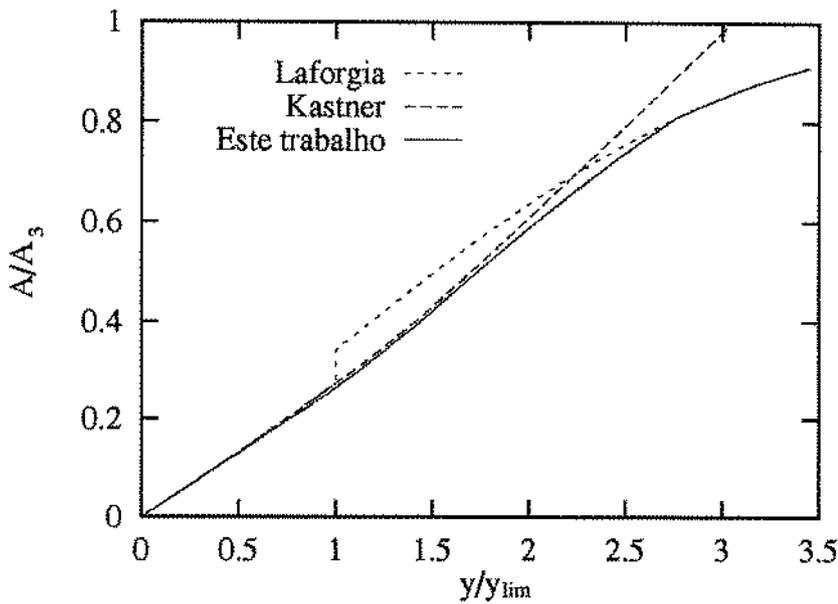


Figura C.8: Comparação da área geométrica mínima computada segundo Laforgia, Kastner e este trabalho.

como coeficientes de ajuste em relação a dados experimentais. Nesse caso, a utilização dos resultados obtidos por esses autores exige que sejam adotadas as mesmas hipóteses que foram consideradas por eles. Isto significa que para utilizar o modelo de coeficiente de redução de área proposto por Laforgia e Ficarella, deve-se admitir que a “seção de área mínima” é aquela que esses autores definiram.

C.1 A Elevação Instantânea da Válvula.

Para o cálculo da variação da elevação da válvula em função do ângulo de giro do virabrequim $y(\theta)$, tem-se adotado o modelo parabólico em virtude da sua simplicidade [29, 120, 123]. Nesse modelo, a função $y(\theta)$ é aproximada por três parábolas concordantes, como mostrado na Figura C.9

O perfil parabólico de elevação da válvula pode ser definido especificando a duração do evento θ_v , a elevação máxima y_{max} , e a relação das acelerações correspondentes às trajetórias pelas parábolas laterais e central respectivamente $r_{ac} = a_1/a_2$. A elevação instantânea é determinada pela seguinte expressão

$$y = \begin{cases} 2n y_{max} \left(\frac{\theta}{\theta_v}\right)^2 & 0 \leq \theta \leq \frac{\theta_v}{n} \\ \frac{2n}{r_{ac}} y_{max} \left(\left(\frac{\theta}{\theta_v} - \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{r_{ac}}{2n}\right) & \frac{\theta_v}{n} \leq \theta \leq \frac{n-1}{n} \theta_v \\ 2n y_{max} \left(1 - \frac{\theta}{\theta_v}\right)^2 & \frac{n-1}{n} \theta_v \leq \theta \leq \theta_v \end{cases}$$

onde

$$n = 2(1 - r_{ac})$$

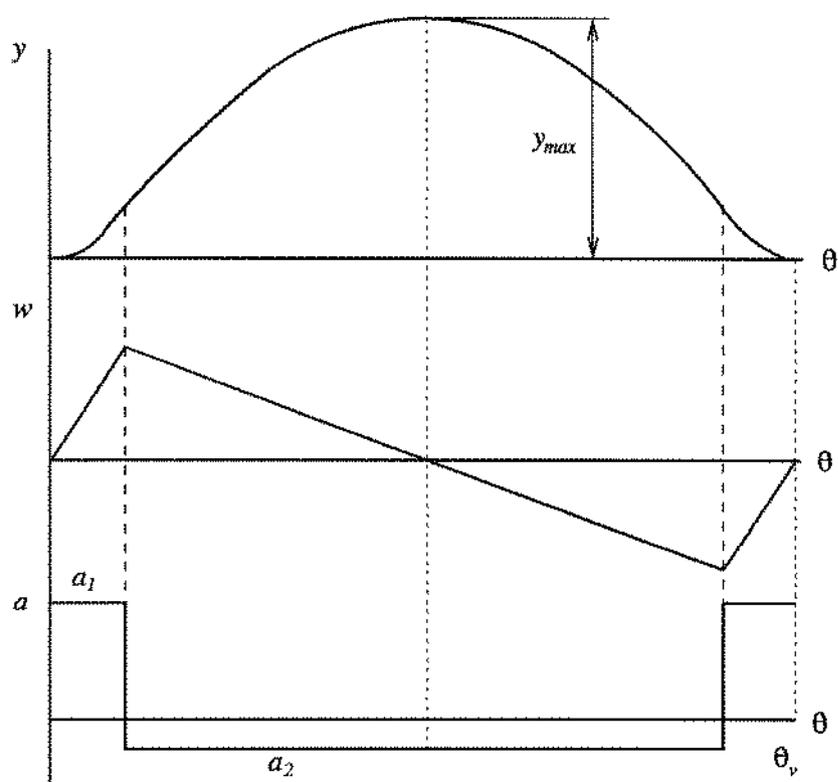


Figura C.9: Modelo parabólico de elevação da válvula.

Apêndice D

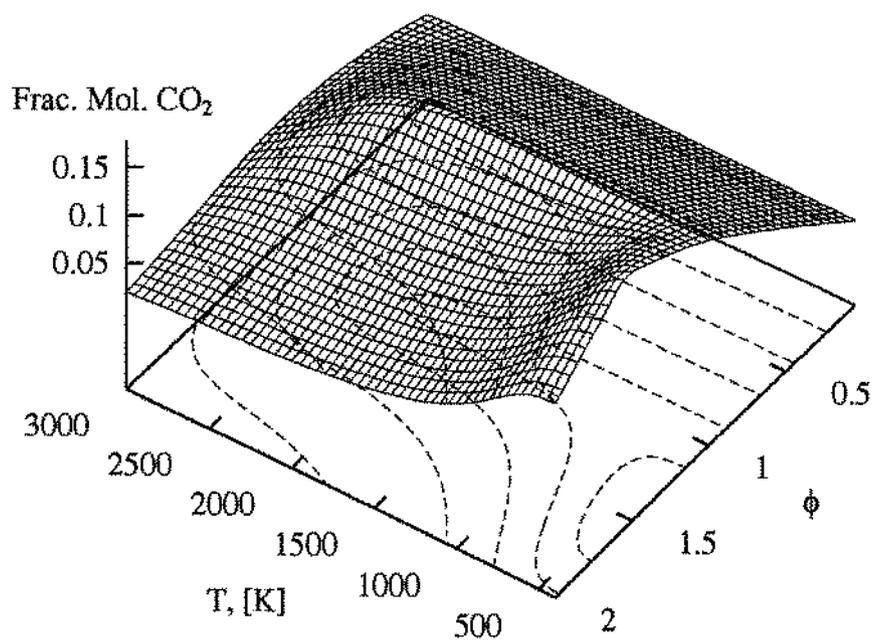
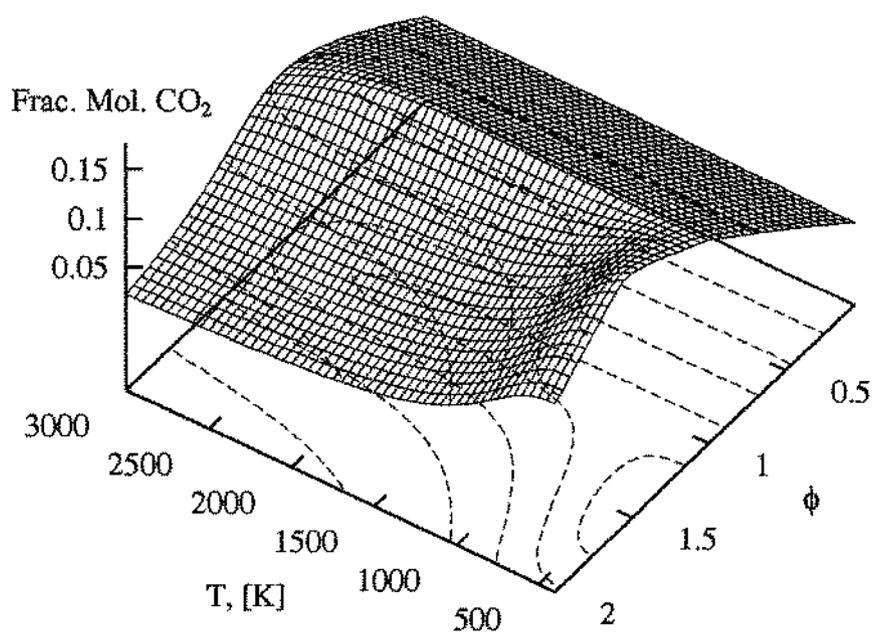
Análise da Composição dos Produtos de Combustão

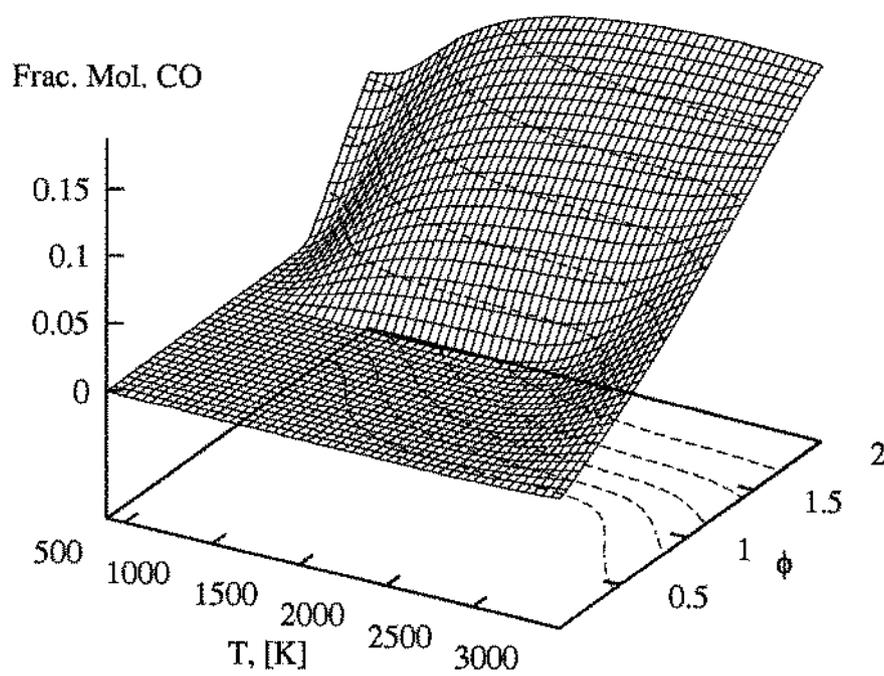
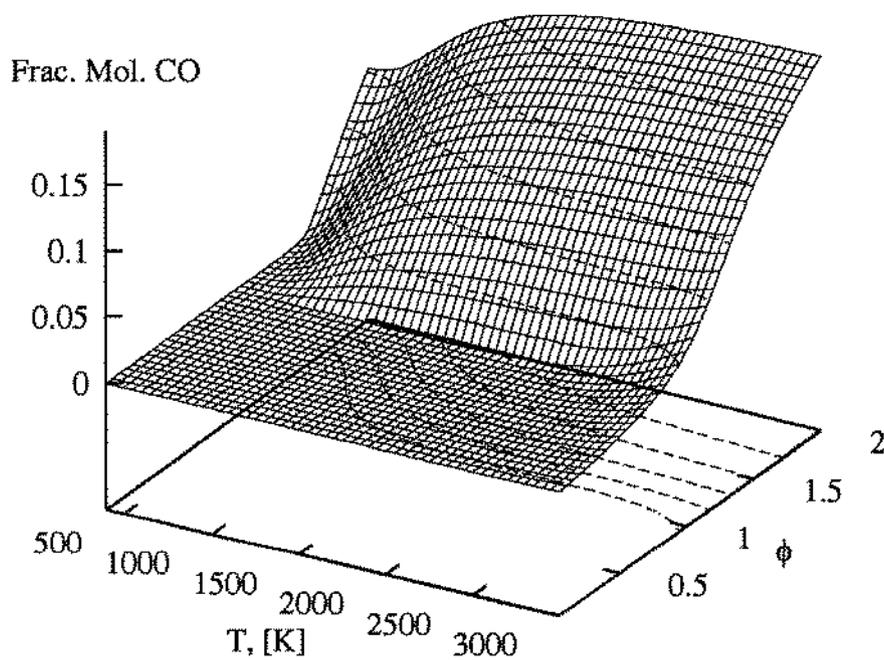
Com o objetivo de analisar a variação da composição de equilíbrio dos produtos de combustão em função da temperatura (T), da pressão (p) e da relação de equivalência combustível-ar (ϕ), foram construídos gráficos em três dimensões nos quais a variável dependente é a fração molar de cada uma das substâncias constituintes, enquanto que as independentes são T e ϕ . Tais gráficos foram obtidos para dois valores da pressão — 1 e 50 bar. Com isto espera-se caracterizar a variação das concentrações molares tanto a baixa quanto a alta pressão. Embora a relação de equivalência média no cilindro do motor diesel (ϕ) — a qual é relevante para o modelo de uma zona de combustão — seja menor que 1 quando o motor opera normalmente, nos gráficos aqui reportados têm sido considerados valores de ϕ que vão até 2. Isto é feito visando mostrar as características das funções $x_i = f(T, \phi)$ tanto na região de mistura pobre como na de mistura rica.

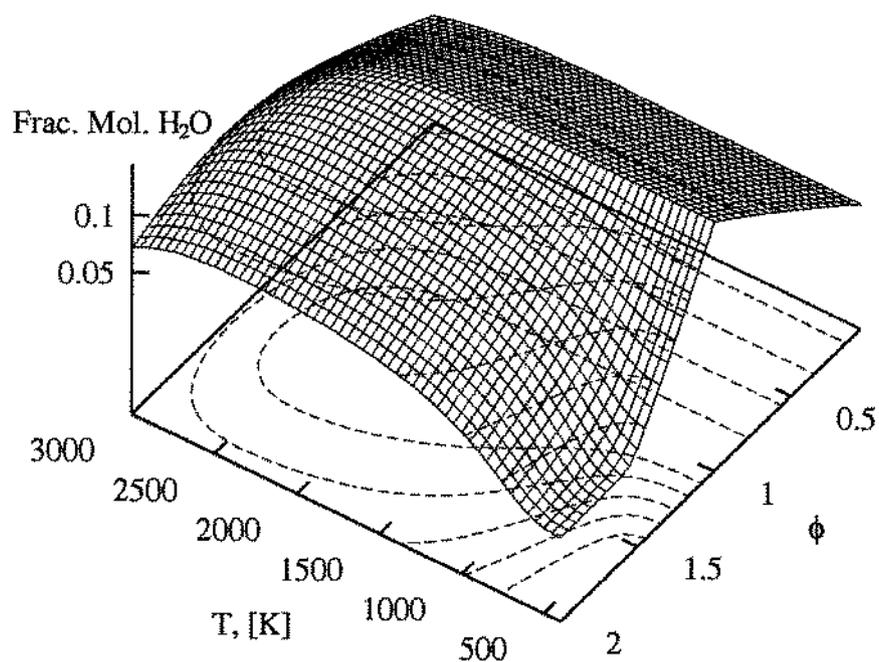
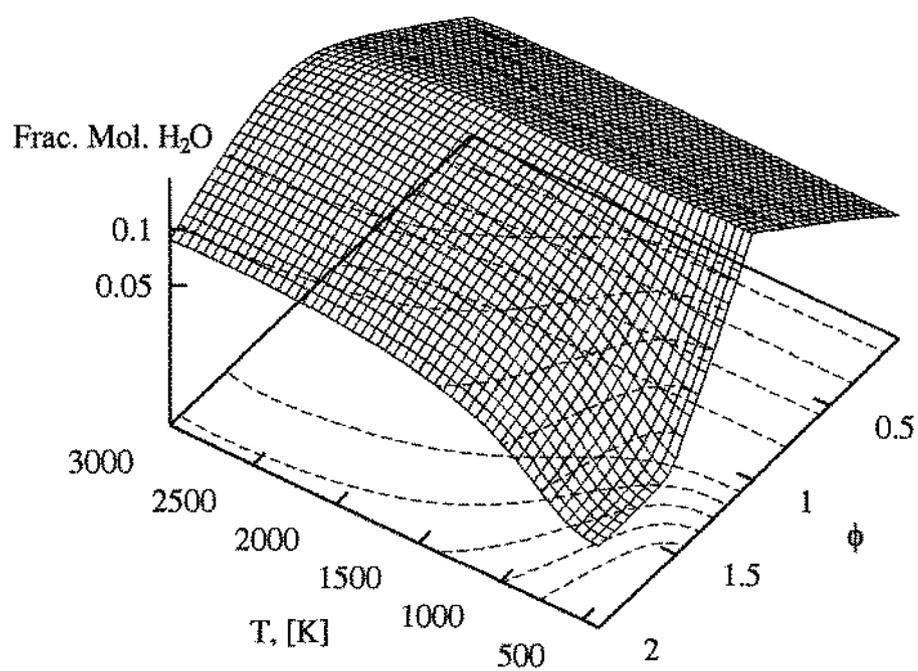
Nos cálculos foi considerado o óleo *T-T diesel* [4] cuja fórmula empírica é $C_{14.4}H_{24.9}$. Outros dados deste combustível são mostrados na Tabela 5.1 (página 67). Admite-se também que a composição do ar corresponde aos dados mostrados na Tabela D.1.

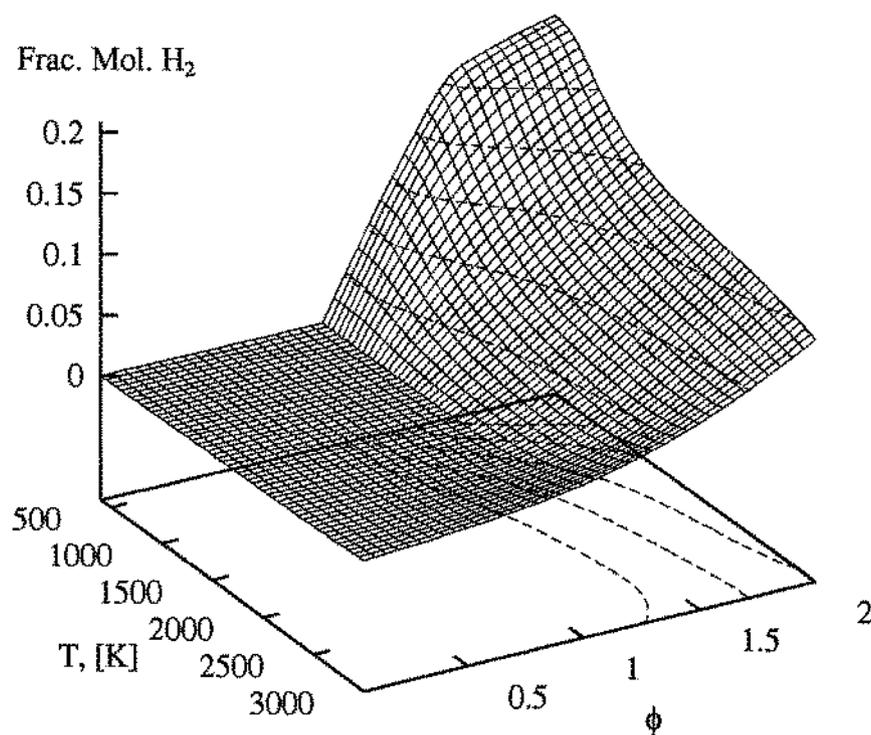
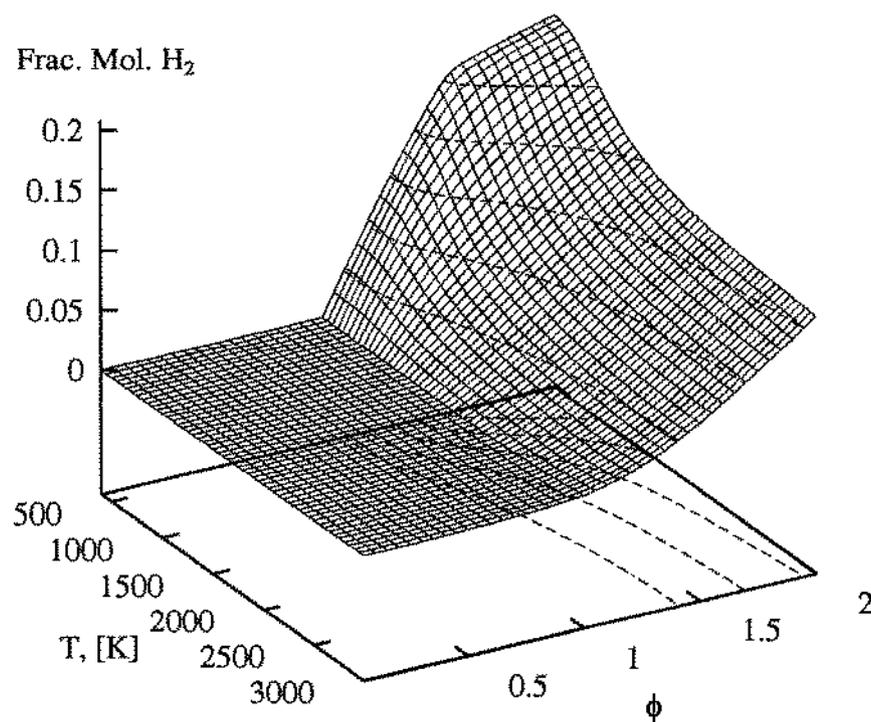
Tabela D.1: Composição do ar.

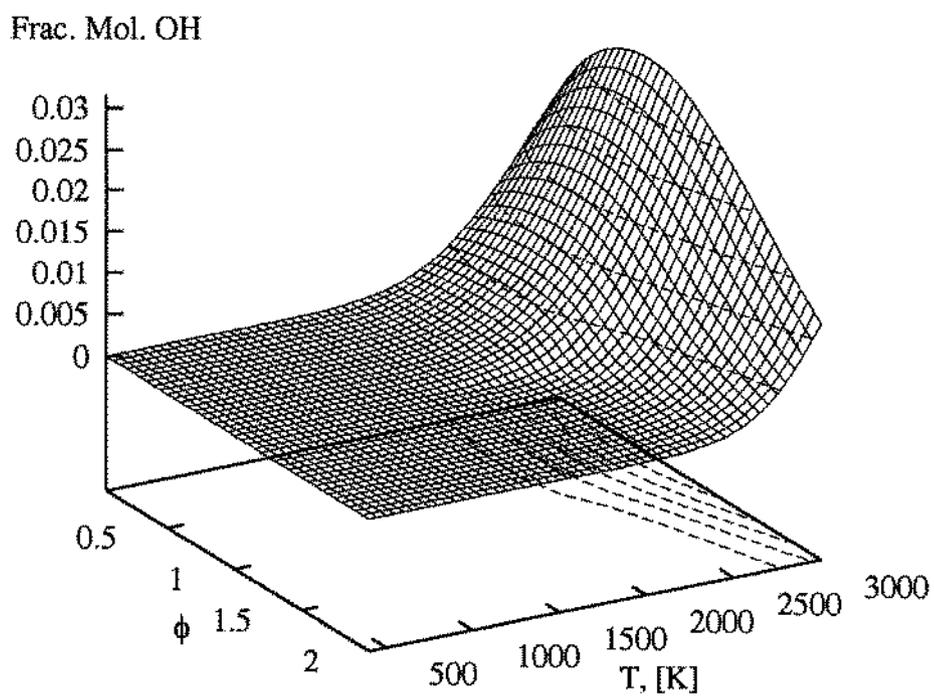
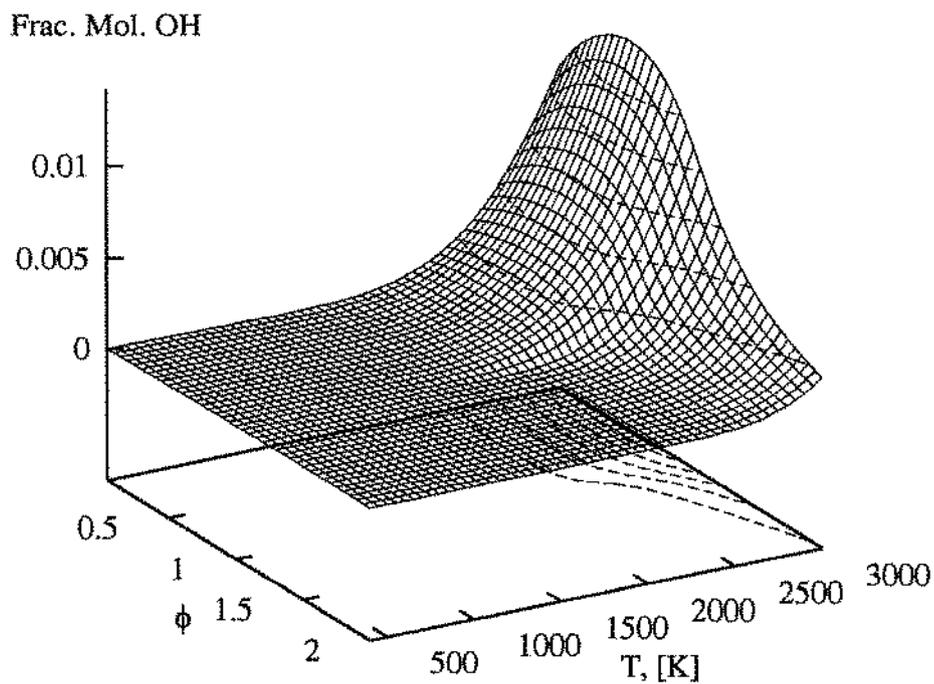
Componente		Fração Molar
Nitrogênio	N_2	0.7565
Oxigênio	O_2	0.2029
Dióxido de Carbono	CO_2	0.0003
Água	H_2O	0.0313
Argônio	Ar	0.0090

Figura D.1: Fração molar de CO_2 — $p = 1$ bar.Figura D.2: Fração molar de CO_2 — $p = 50$ bar.

Figura D.3: Fração molar de CO — $p = 1$ bar.Figura D.4: Fração molar de CO — $p = 50$ bar.

Figura D.5: Fração molar de H_2O — $p = 1$ bar.Figura D.6: Fração molar de H_2O — $p = 50$ bar.

Figura D.7: Fração molar de H_2 — $p = 1$ bar.Figura D.8: Fração molar de H_2 — $p = 50$ bar.

Figura D.9: Fração molar de OH — $p = 1$ bar.Figura D.10: Fração molar de OH — $p = 50$ bar.

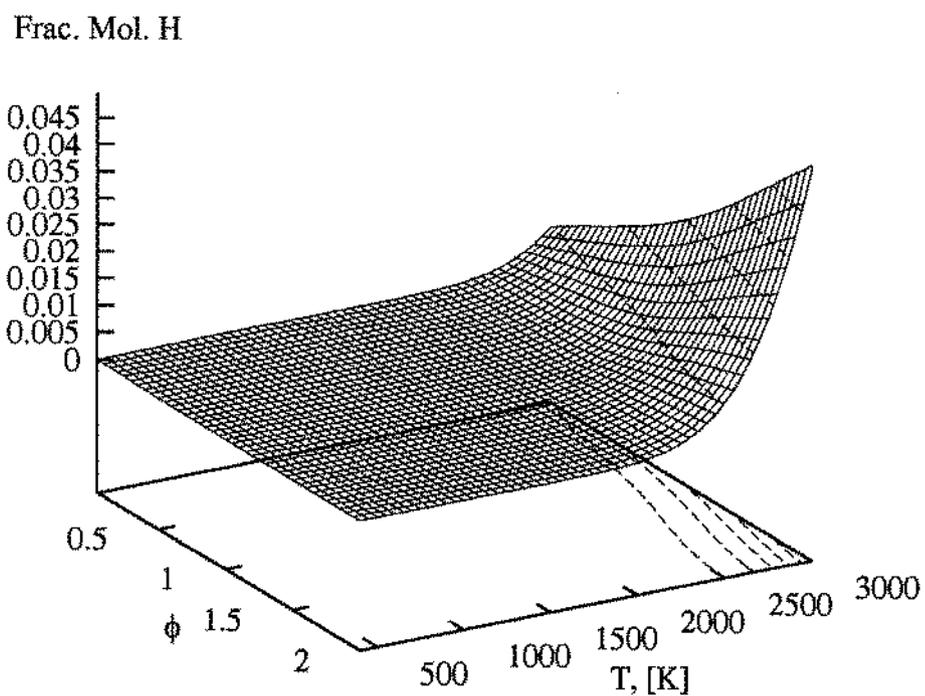


Figura D.11: Fração molar de H — $p = 1$ bar.

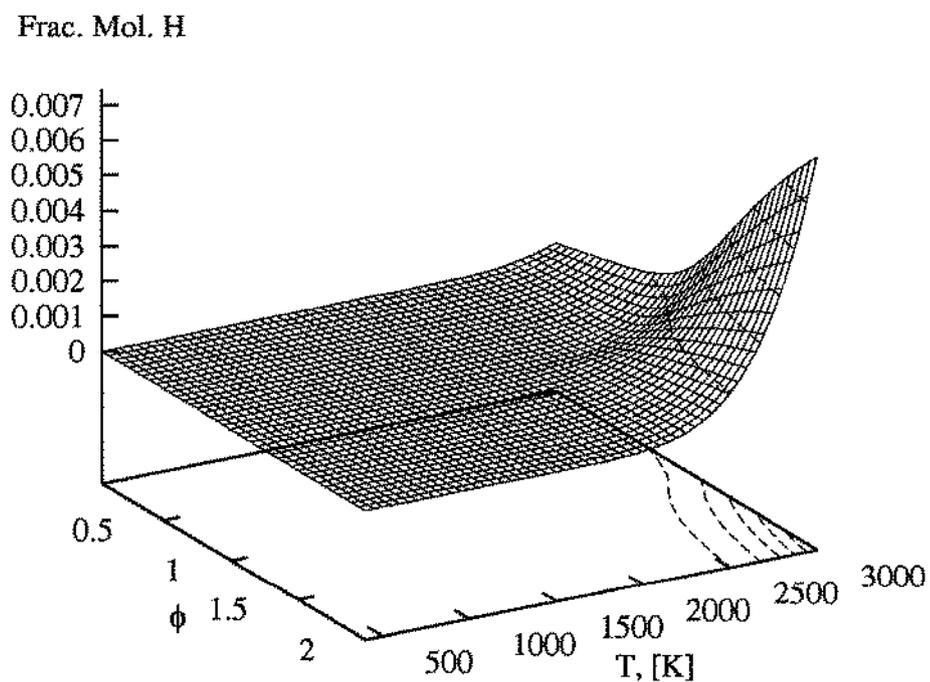
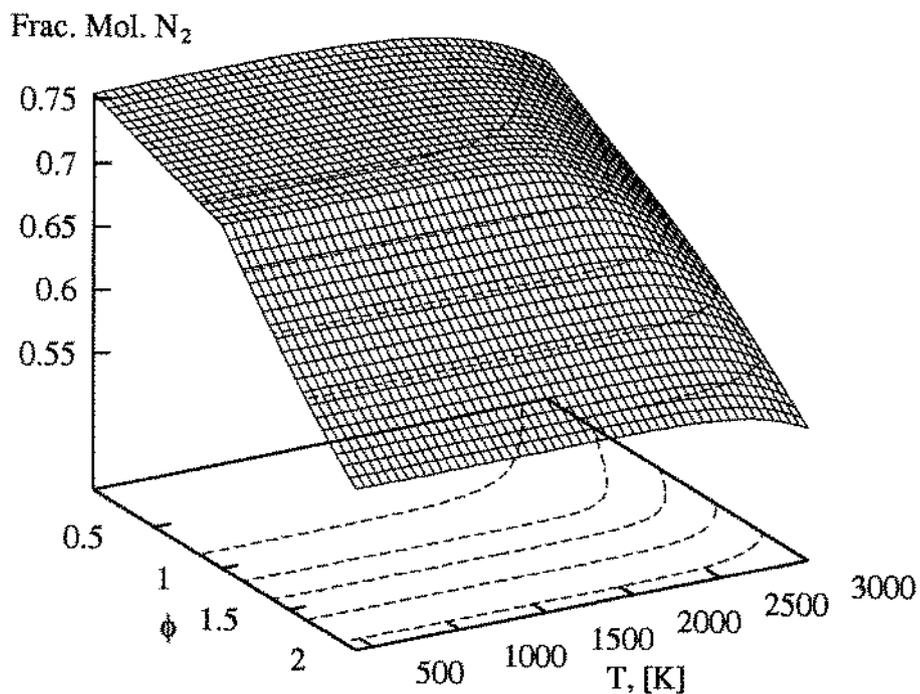
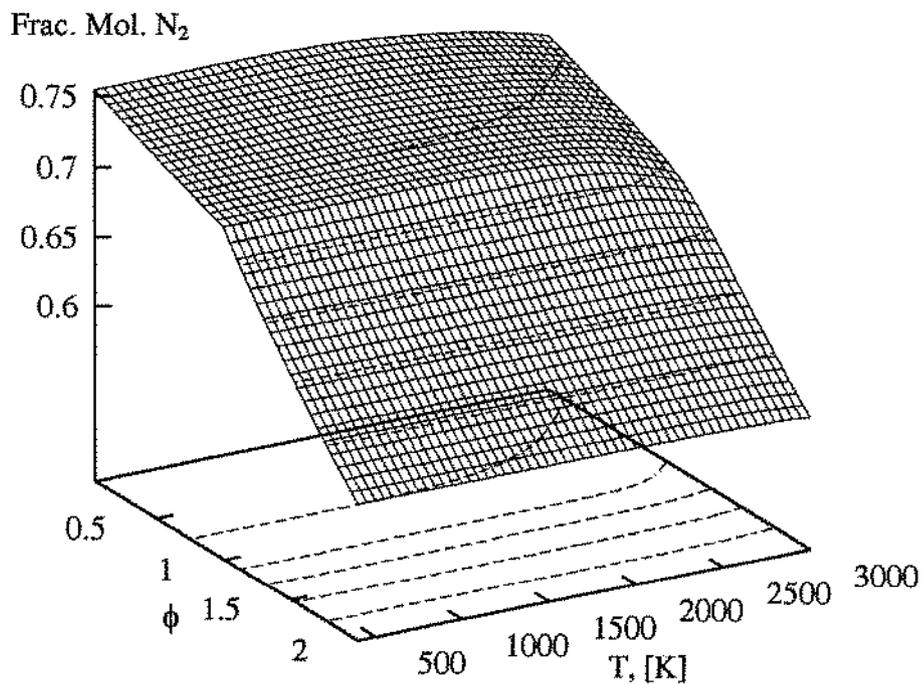
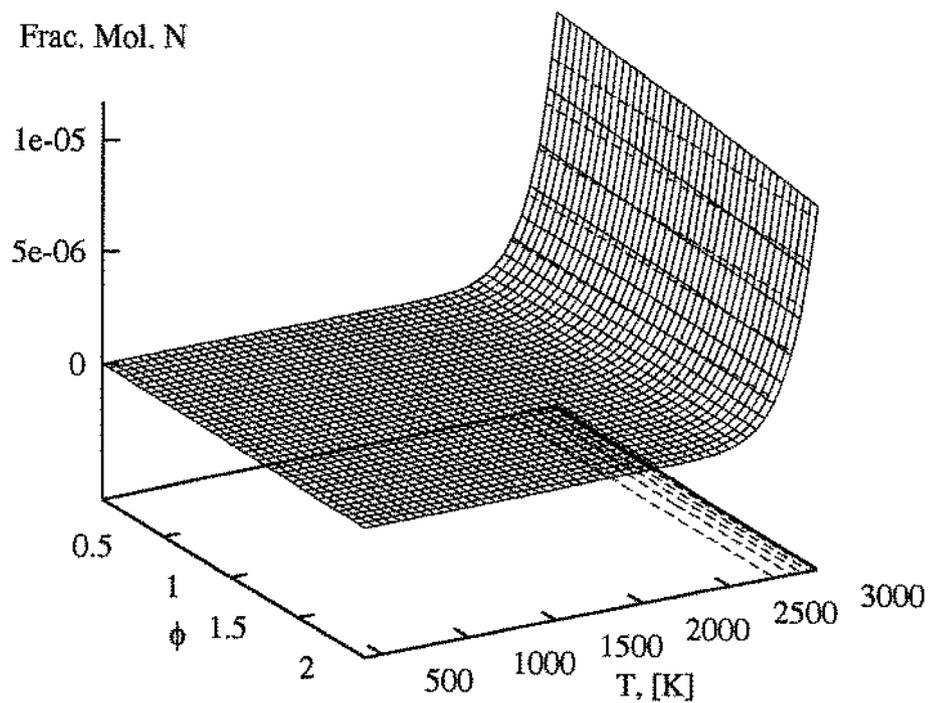
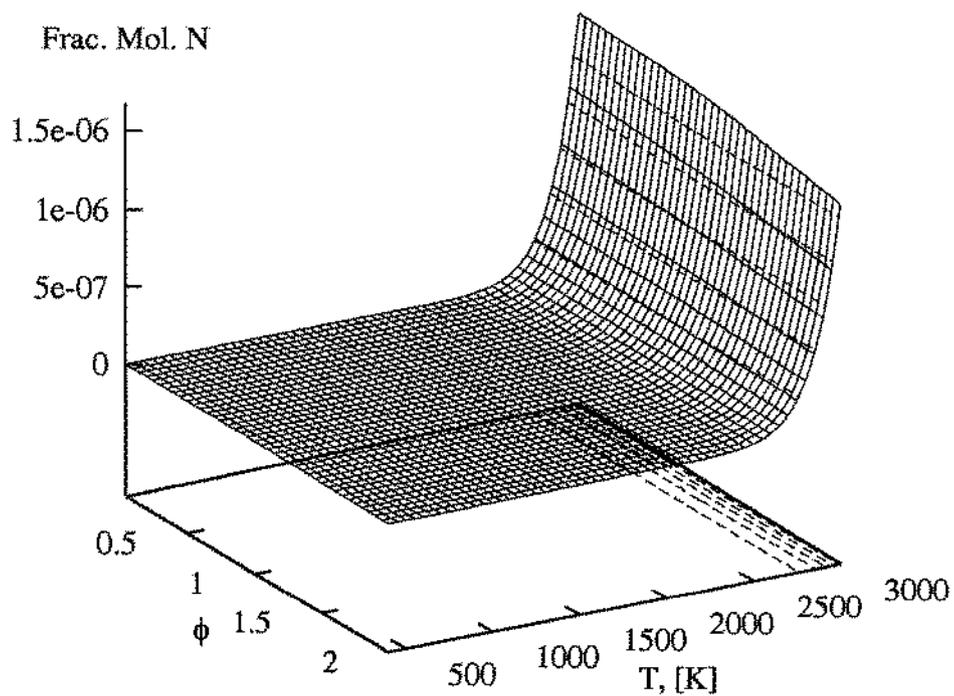
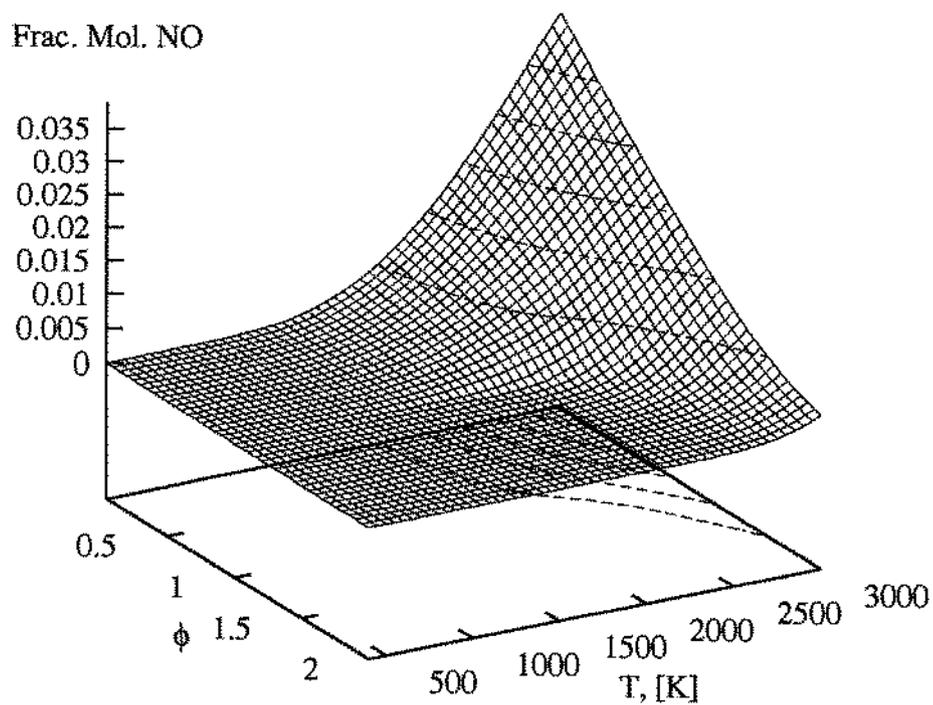
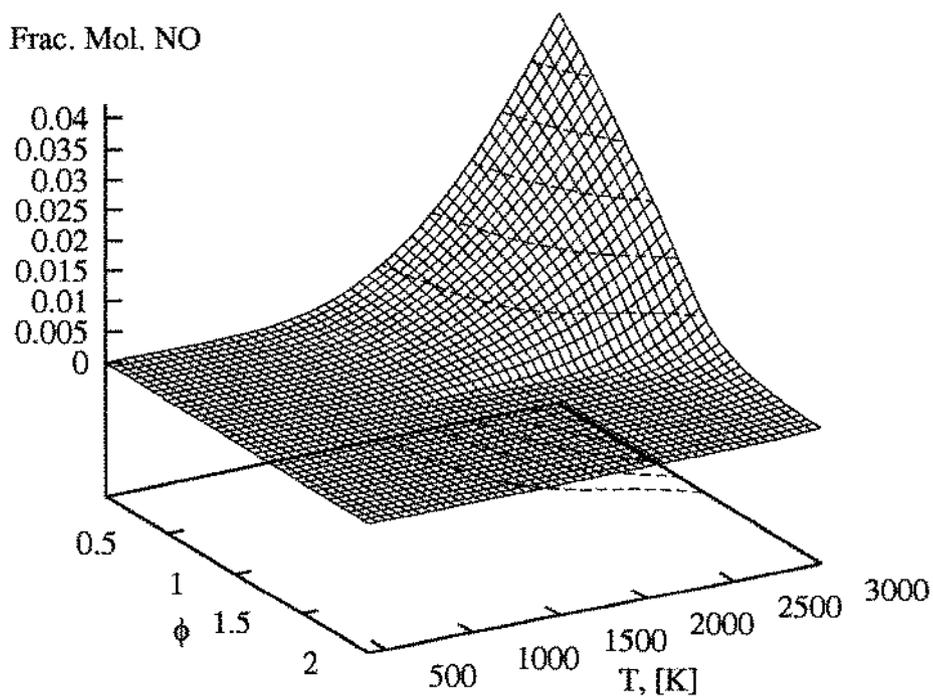
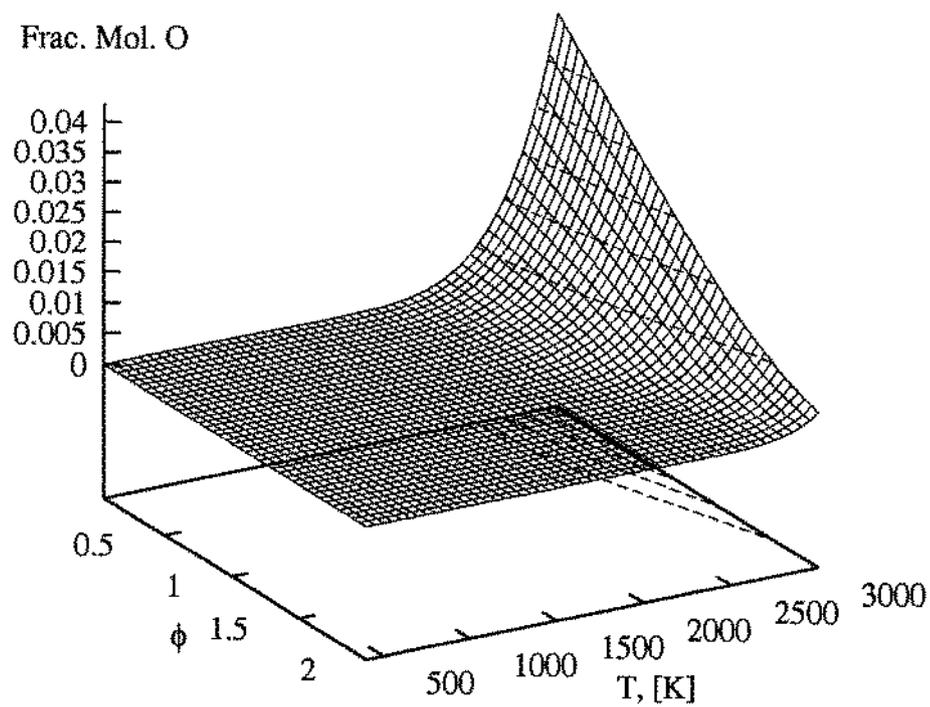
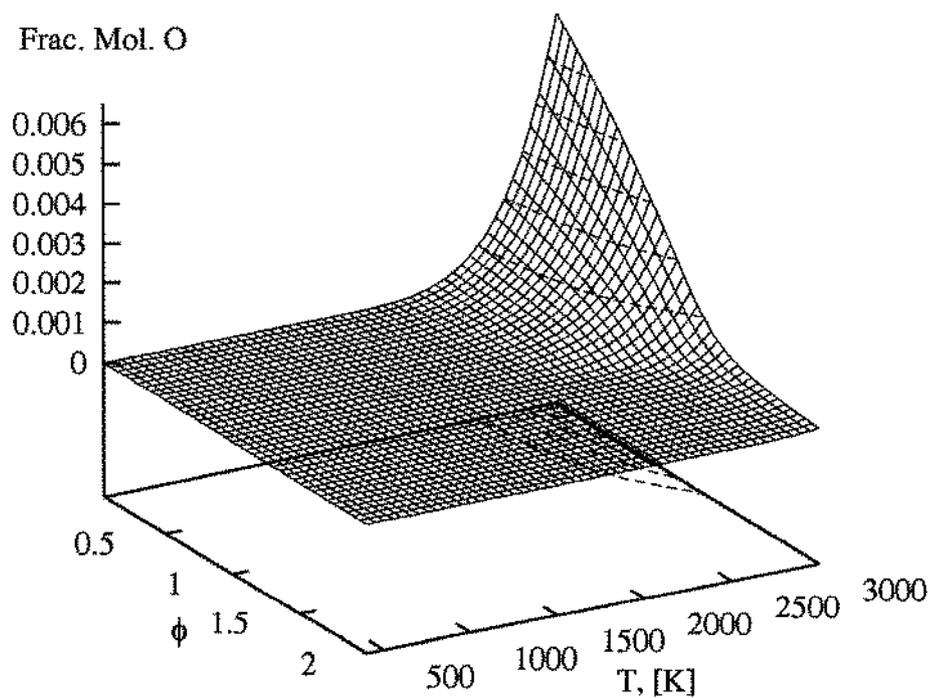


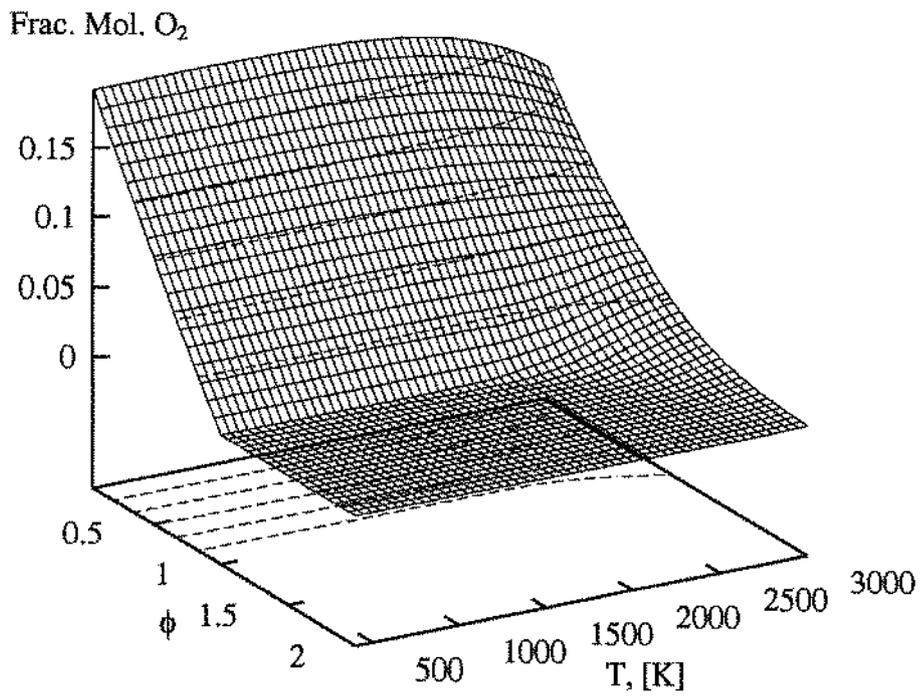
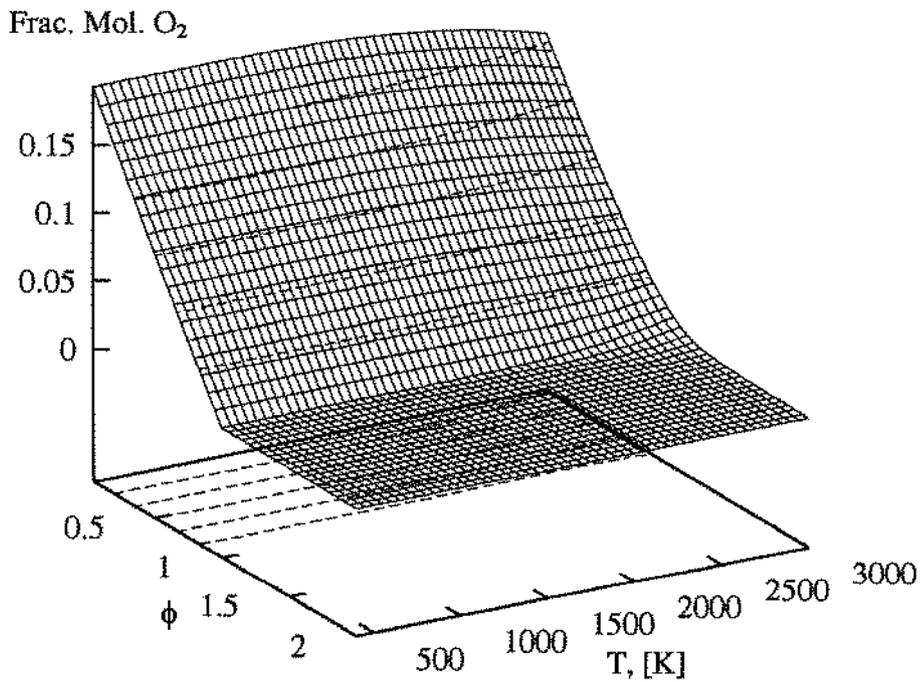
Figura D.12: Fração molar de H — $p = 50$ bar.

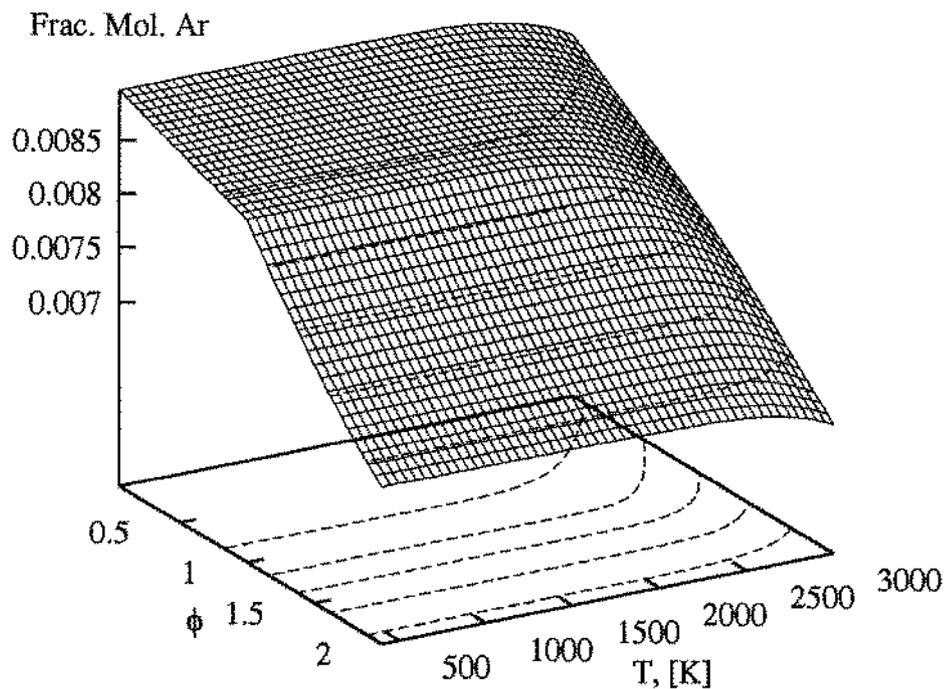
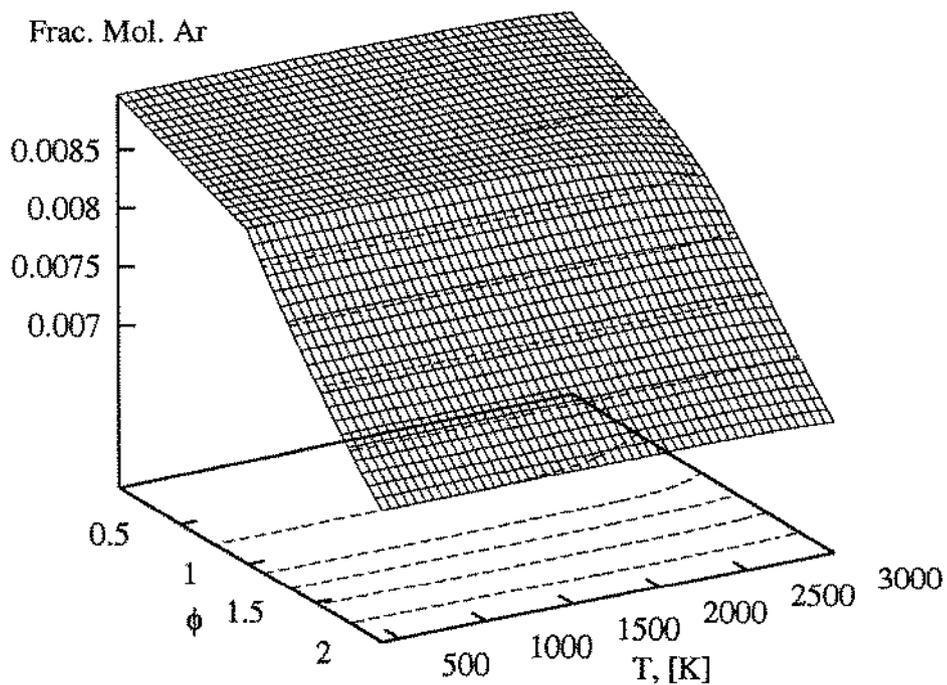
Figura D.13: Fração molar de N_2 — $p = 1$ bar.Figura D.14: Fração molar de N_2 — $p = 50$ bar.

Figura D.15: Fração molar de N — $p = 1$ bar.Figura D.16: Fração molar de N — $p = 50$ bar.

Figura D.17: Fração molar de NO — $p = 1$ bar.Figura D.18: Fração molar de NO — $p = 50$ bar.

Figura D.19: Fração molar de O — $p = 1$ bar.Figura D.20: Fração molar de O — $p = 50$ bar.

Figura D.21: Fração molar de O_2 — $p = 1$ bar.Figura D.22: Fração molar de O_2 — $p = 50$ bar.

Figura D.23: Fração molar de Ar — $p = 1$ bar.Figura D.24: Fração molar de Ar — $p = 50$ bar.

Nas Figuras D.1 e D.2 pode-se observar que enquanto a mistura combustível-ar é pobre, a fração molar de dióxido de carbono (CO_2) aumenta em uma proporção quase linear com a taxa de equivalência ϕ . Este comportamento é de se esperar uma vez que a quantidade de carbono na mistura aumenta proporcionalmente à taxa de equivalência e, como existe um excesso de oxigênio, a oxidação do carbono ocorre de forma essencialmente completa. Ainda na região de mistura pobre observa-se que o crescimento da fração molar de CO_2 devido ao aumento de ϕ , é menos intenso quando a temperatura é maior que 2000 K do que a temperaturas mais baixas. Isto deve-se à dissociação de CO_2 com a consequente formação de CO , o que pode também ser verificado através das Figuras D.3 e D.4, onde se vê que a fração molar de CO — a qual é praticamente nula na região de mistura pobre quando a temperatura é inferior a 2000 K — começa a crescer em função do aumento de ϕ , aproximadamente a partir de 2000 K. Comparando-se as Figuras D.1 com D.2 e D.3 com D.4, pode-se notar que a dissociação do CO_2 para formar CO é mais intensa a baixas pressões.

A passagem para a região de mistura rica ($\phi > 1$), é acompanhada com uma drástica mudança no comportamento das frações molares da maioria dos componentes, o que origina que em muitos casos se observe uma “dobra” nas superfícies representadas. Para explicar isto, deve-se levar em conta que, quando a combustão ocorre com escassez de oxigênio — como é característico para as misturas ricas — são formados produtos de oxidação parcial e produtos não oxidados (CO , H_2). Se a análise fosse feita no sentido de se avaliar o número de moles formados pela combustão de uma massa fixa de mistura, seria observado que ocorre um aumento no número total de moles de produtos quando a taxa de equivalência ϕ aumenta. Além disso, seria notado que a velocidade com que ocorre este crescimento é maior quando a mistura é rica do que quando ela é pobre. Isto se deve, principalmente, ao fato que tanto as moléculas formadas por oxidação parcial como aquelas que não são oxidadas, têm massa molecular menor que as moléculas que seriam formadas por oxidação completa. Quando se analisa a composição dos produtos de combustão em uma base molar, como neste caso, a formação de produtos parcialmente oxidados e de produtos não oxidados leva à alteração da velocidade com que varia a fração molar dos componentes, em função do teor de mistura, quando se passa da região de mistura pobre para a região de mistura rica. Isto pode ser claramente observado nas Figuras D.23 e D.24 onde é mostrada a fração molar de argônio, que é um gás inerte e portanto não participa de reações químicas. Nestas figuras observa-se que o ritmo com que diminui a fração molar de Ar é maior quando a mistura é rica do que quando ela é pobre. Esta diferença na taxa de variação é responsável pela presença da “dobra” na superfície.

Feitos estes comentários, é conveniente voltar à análise das Figuras D.1, D.2, D.3 e D.4. Deve ser mencionado que quando a mistura é rica, a escassez de oxigênio não permite que todo o carbono do combustível seja oxidado completamente, o que determina que se forme o monóxido de carbono (CO). A fração molar de CO aumenta na medida que a mistura fica mais rica, entanto que a

fração molar de CO_2 diminui com o aumento de ϕ . Nesta região de mistura rica também podem ser observados os efeitos da dissociação que ocorre a altas temperaturas (acima de 2000 K). É por causa desta dissociação que a “dobra” na superfície acaba se atenuando. Pode-se perceber que devido à dissociação, a diminuição da fração molar de CO_2 e o conseqüente aumento de CO resultam intensificados.

Um outro fato interessante que pode ser notado nas Figuras D.1, D.2, D.3 e D.4 diz respeito à localização da “dobra” na faixa de temperaturas abaixo de 700 K. Observa-se que nessa região esta “dobra” se encontra em torno de $\phi = 1.5$, enquanto que em outras regiões ela se localiza em $\phi = 1$. Também nas Figuras D.5, D.6, D.7 e D.8 pode-se ver uma mudança na velocidade de variação das frações molares de H_2O e H_2 nas proximidades da região delimitada pelos valores $T \approx 700$ e $\phi \approx 1.5$. Ao analisar estas figuras observa-se que na região de mistura pobre — quando o oxigênio disponível é suficiente para oxidar completamente tanto o carbono como o hidrogênio — ocorre um aumento da fração molar de CO_2 e H_2O , enquanto que as concentrações molares de CO e H_2 permanecem quase nulas. Até aqui nada foge do previsível, porém, quando a mistura se torna rica, nota-se que as frações molares de CO_2 e de CO continuam mostrando o mesmo comportamento que tinham quando a mistura era pobre. Ou seja, a fração molar de CO_2 continua aumentando e a de CO permanece próxima de zero. Isto ocorre até $\phi \approx 1.5$. De outro lado, a concentração molar de H_2O diminui com o conseqüente aumento da concentração molar de H_2 . Aliás, tanto a diminuição da concentração molar de H_2O como o aumento da de H_2 ocorrem inicialmente em um ritmo bastante acelerado (até $\phi \approx 1.5$) e posteriormente este ritmo diminui. A explicação inferida para este fenômeno se baseia na idéia que, na faixa de temperatura abaixo de 700 K e até um valor da taxa de equivalência próximo a 1.5, o oxigênio interage preferencialmente com o carbono formando CO_2 . Assim, na falta de oxigênio suficiente para oxidar todo o carbono e todo o hidrogênio, o carbono é oxidado em primeiro lugar e só então, se sobrar oxigênio, começa a ser oxidado o hidrogênio. A parte do hidrogênio que não encontra oxigênio para formar H_2O aparece como hidrogênio diatômico (H_2). Isto explica o rápido aumento da fração molar de H_2 logo depois que a mistura se torna rica.

Nas Figuras D.9, D.10, D.11, e D.12 são mostradas as frações molares de hidroxila (OH) e de hidrogênio atômico (H). Ambas estas substâncias atingem níveis de concentração significativos apenas a temperaturas elevadas (acima de 2000 K), o que indica que elas são formadas principalmente por dissociação (a partir de H_2O , H_2 e O_2). No caso do radical hidroxila, a fração molar é maior quando a mistura é pobre, o que provavelmente se deve à existência de oxigênio disponível para a oxidação parcial do hidrogênio atômico. Já quando a mistura é rica, o hidrogênio atômico se encontra em concentrações molares maiores pois não há oxigênio disponível para a sua oxidação. Comparando-se as Figuras D.9 com D.10 e D.11 com D.12, observa-se que quando a pressão é alta, as concentrações molares de OH e H diminuem, o que se deve a que ambas estas substâncias são formadas principalmente por dissociação, a qual

resulta inibida com o aumento da pressão.

A fração molar de nitrogênio diatômico (N_2), mostrada nas Figuras D.13 e D.14, apresenta o formato esperado — diminui a medida que a mistura vai ficando mais rica. A presença da inflexão nestas figuras quando $\phi = 1$, deve-se essencialmente aos mesmos motivos que no caso da fração molar de argônio (Figuras D.23 e D.24), o que já foi discutido acima. Os efeitos da pressão sobre a fração molar de N_2 se fazem notórios apenas a altas temperaturas mostrando mais uma vez que a dissociação resulta inibida quando a pressão aumenta. Esta mesma tendência é observada nas Figuras D.15 e D.16 nas quais é mostrada a concentração molar do nitrogênio atômico. Este componente é formado pela dissociação do N_2 , por isso, aparece em quantidades significativas apenas a altas temperaturas. Nota-se nestas figuras que o teor de mistura não exerce influência significativa sobre a concentração molar de N .

O monóxido de nitrogênio (Figuras D.17 e D.18) é formado a temperaturas elevadas (acima de 1500 K) e principalmente quando o oxigênio é abundante na mistura (mistura pobre). Um formato similar ao de NO é exibido pela fração molar de oxigênio monoatômico (Figuras D.19 e D.20), o qual é formado pela dissociação de O_2 . O oxigênio diatômico (Figuras D.21 e D.22) tem a forma esperada — a sua concentração diminui a medida que a mistura se enriquece.