

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENERGIA

Análise de Liberação de Energia em Motores Diesel Operando com Combustíveis Alternativos

Autor: André Valente Bueno
Orientador: Luiz Fernando Milanez
Co-orientador: José A. Velásquez

Curso: Engenharia Mecânica
Área de Concentração: Térmica e Flúidos

Dissertação de mestrado acadêmico apresentada à comissão de Pós Graduação da Faculdade de Engenharia Mecânica, como requisito para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Campinas, 2003
S.P. – Brasil

UNIDADE	BC
Nº CHAMADA	1/Unicamp B862a
V	EX
TOMBO BC/	59612
PROC.	16-2109/04
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	11,00
DATA	14/09/2004
Nº CPD	

CM00199614--0

Bib Id 321235

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

<p>B243a B862a</p>	<p>Bueno, André Valente Análise de liberação de energia em motores diesel operando com combustíveis alternativos / André Valente Bueno.--Campinas, SP: [s.n.], 2003.</p> <p>Orientadores: Luiz Fernando Milanez e José A. Velásquez. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica.</p> <p>1. Motor diesel. 2. Motores de combustão interna. 3. Combustíveis renováveis para motores diesel. I. Milanez, Luiz Fernando. II. Velásquez Alegre, Jose Antonio Andres. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Mecânica. IV. Título.</p>
-----------------------------------	---

TESE DEFENDIDA POR *André Valente Bueno*

E APROVADA PELA

COMISSÃO JULGADORA EM 19/03/2003

[Handwritten Signature]
ORIENTADOR

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Análise de Liberação de Energia em Motores Diesel Operando com Combustíveis Alternativos

200413796

Autor: André Valente Bueno
Orientador: Luiz Fernando Milanez
Co-orientador: José A. Velásquez

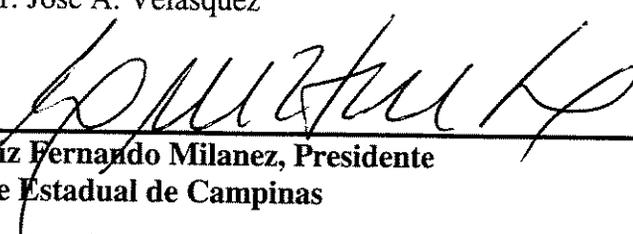
03/2003

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL
SEÇÃO CIRCULANTE

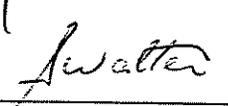
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
DEPARTAMENTO DE ENERGIA
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO ACADÊMICO

Análise de Liberação de Energia em Motores Diesel Operando com Combustíveis Alternativos

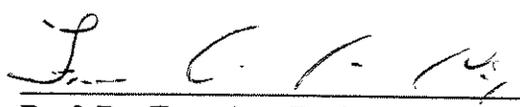
Autor: André Valente Bueno
Orientador: Luiz Fernando Milanez
Co-orientador: José A. Velásquez



Prof. Dr. Luiz Fernando Milanez, Presidente
Universidade Estadual de Campinas



Prof. Dr. Arnaldo César da Silva Walter
Universidade Estadual de Campinas



Prof. Dr. Francisco Emílio Baccaro Nigro
Instituto de Pesquisas Tecnológicas

Campinas, 19 de março de 2003

Agradecimentos

Aos professores Dr. Luiz Fernando Milanez e Dr. José A. Velásquez, pela orientação sólida e paciente.

Aos professores e colegas do departamento de energia, pelo auxílio durante a realização deste trabalho.

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), pela concessão de bolsa de estudo durante o período de mestrado.

À Pontifícia Universidade Católica do Paraná, por disponibilizar seu Laboratório de Termodinâmica Avançada para a realização deste trabalho.

Resumo

BUENO, André Valente, *Análise de Liberação de Energia em Motores Diesel Operando com Combustíveis Alternativos*, Campinas: Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 2003. 107 p. Dissertação (Mestrado).

Os desafios técnicos impostos pelo crescente controle no nível de emissão de poluentes, demanda por redução de consumo e substituição dos combustíveis fósseis empregados nos motores de ciclo diesel concentram uma parcela apreciável dos estudos realizados na área de combustão. Nestes estudos, a identificação de padrões de liberação de energia durante a queima possui elevado grau de importância.

A taxa aparente de liberação de energia pode ser obtida a partir de diagramas experimentais de pressão no cilindro, usualmente adotando-se um modelo de uma zona de combustão. Neste modelo costuma-se assumir que a pressão e temperatura da câmara de combustão são uniformes e, ainda, que o combustível injetado é queimado instantaneamente. Desta maneira, o período de ignição do combustível injetado e a presença de combustível não queimado no fluido de trabalho são negligenciados.

Propõe-se, no presente estudo, uma abordagem alternativa para o levantamento da taxa aparente de liberação de energia. Esta abordagem promove a separação entre a injeção e a queima do combustível, considerando-se a presença de combustível no fluido de trabalho. Os resultados obtidos para a massa total de combustível queimada, sob tal abordagem, mostram-se consideravelmente realistas. Exemplos da aplicação desta abordagem durante o estudo da combustão de misturas entre óleo diesel e biodiesel em motores de ignição por compressão também serão reportados e discutidos no presente trabalho.

Palavras Chave

- Motores Diesel, Biodiesel, Análise de Liberação de Energia.

Abstract

BUENO, André Valente, Heat Release Analysis in Diesel Engines Operating with Alternative Fuels: Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 2003. 107 p. Dissertação (Mestrado).

The combustion process in Diesel cycle engine has been highly studied since it remains an excellent alternative for future personal transportation power-trains, due to its high thermal efficiency, future orientation, low fuel consumption and the perspective of minor emissions. Technical challenges of exhaust emission control, energy conservation as well as substitution of fossil fuel are the main efforts in the diesel combustion area. In these studies it is especially important to identify the temporal rate of energy release occurring during the combustion process.

The apparent combustion heat release rate is calculated from experimental cylinder pressure data and, usually, adopting the single zone combustion model. According to this model, it is admitted that pressure and temperature are uniform thorough the entire cylinder volume and that injected fuel instantaneously vaporizes, mixes with in-cylinder gases and burns out. Thus, the ignition delay and the presence of unburned fuel in the combustion chamber are not taken into account.

It is proposed an alternative approach for calculating the apparent heat release rate during combustion. The proposed approach permits to distinguish between the rate of fuel injection and the apparent rate of fuel burning. By this way, it is possible to take into consideration the existence of unburned fuel in the engine cylinder and the obtained results become more realistic. Examples of the application of this approach to the study of combustion of blends of biodiesel and diesel fuel are reported and discussed in this work.

Key Words

Diesel Engines, Biodiesel, Heat Release Analysis

Índice

Capítulo 1 - Introdução	1
Capítulo 2 – A Taxa Aparente de Liberação de Energia	3
2.1 A liberação de energia em um motor de ciclo diesel.....	3
2.1.1 A identificação dos processos ocorrentes durante a combustão.....	4
2.1.2 Uma breve descrição dos processos ocorrentes durante a combustão.....	5
2.2 O levantamento da taxa aparente de liberação de energia.....	7
2.2.1 A hipótese de homogeneidade da carga do cilindro.....	9
2.2.2 A hipótese de queima instantânea do combustível.....	11
2.2.3 Os efeitos da cinética química de pré-chama e da preparação da mistura combustível.....	15
2.3 A interpolação das curvas de taxa aparente de queima.....	16
2.4 Modelos preditivos de uma zona de combustão.....	19
Capítulo 3 - Modelos de Uma Zona de Combustão	21
3.1 Obtenção de um modelo de liberação de energia.....	21
3.2 Obtenção de um modelo preditivo.....	30
Capítulo 4 - Propriedades Termodinâmicas do Fluido de Trabalho	32
4.1 Processos ocorrentes no fluido de trabalho.....	33
4.1.1 Retardo da ignição.....	33
4.1.2 Combustão pré-misturada.....	34
4.1.3 Combustão difusiva.....	34

4.2	Tratamento do fluido de trabalho em modelos multidimensionais.	35
4.3	Tratamento do fluido de trabalho em modelos termodinâmicos.	38
4.4	Um modelo baseado em equilíbrio parcial.	40
4.4.1	Os produtos de combustão.....	42
4.4.2	A formulação de um sistema de equações.....	51
4.4.3	A solução do sistema de equações para a composição do fluido de trabalho. .	56
4.4.4	As propriedades termodinâmicas dos produtos de combustão.....	57
4.4.5	As propriedades do fluido de trabalho e suas derivadas.....	60
4.5	A validação da rotina de equilíbrio parcial.....	62
4.5.1	A queima estequiométrica do propano (C_3H_8).	64
Capítulo 5 - O Tratamento Numérico dos Dados de Pressão		69
5.1	Dificuldades relatadas na avaliação dos dados de pressão.	70
5.2	A obtenção experimental dos dados de pressão	71
5.3	As flutuações nos dados de pressão.....	73
5.4	Tratamento numérico de diagramas de pressão obtidos durante um ciclo.	78
5.6	Conclusões quanto ao tratamento numérico dos dados de pressão.	85
Capítulo 6 – A Combustão das Misturas entre Óleo Diesel e Ésteres Etílicos do Óleo de Soja		86
.....		86
6.1	Propriedades do etil-éster de soja e outros combustíveis.	87
6.2	Análise de liberação de energia.	88
6.3	Ensaio de desempenho.	92
6.4	Emissões poluentes e a adição do etil-éster de soja.....	94
6.5	Conclusões quanto aos efeitos da adição do etil-éster de soja.	95
Capítulo 7 - Conclusões.....		96
Referências Bibliográficas		97
Apêndice A		106

Lista de Figuras

<i>Figura 2.1: Diagrama típico de taxa aparente de queima.</i>	6
<i>Figura 2.2: Massas de combustível queimado e não reagido presente no sistema.</i>	11
<i>Figura 2.3: Comparação entre as abordagens de aplicação do modelo de liberação de energia.</i>	13
<i>Figura 2.4: Influência do processo de injeção durante a análise de primeira lei.</i>	14
<i>Figura 2.5 - Influência da cinética de pré-ignição na taxa de equivalência ϕ_b.</i>	15
<i>Figura 3.1: O volume de controle no cilindro.</i>	23
<i>Figura 3.2: Resultados para a simulação preditiva do motor MWM Sprinter</i>	31
<i>Figura 4.1: Frações molares dos produtos de combustão.</i>	66
<i>Figura 5.1: Influência da derivada da pressão no cilindro sob a liberação de energia.</i>	69
<i>Figura 5.2: Variações nos diagramas de pressão entre dois ciclos não consecutivos.</i>	72
<i>Figura 5.3: Dados obtidos para a pressão e sua derivada.</i>	73
<i>Figura 5.4: Periodograma de Lomb para os dados experimentais da derivada da pressão.</i>	74
<i>Figura 5.5: Caracterização da combustão pré-misturada no domínio da frequência.</i>	77
<i>Figura 5.6: Tratamento dos dados de pressão.</i>	80
<i>Figura 5.7: Periodograma de Lomb para o tratamento de dados experimentais.</i>	81
<i>Figura 5.8: Resultados obtidos pela aplicação do tratamento proposto.</i>	81
<i>Figura 6.1: Diagramas para operação em baixa carga (40% de carga a 1400 rpm).</i>	89
<i>Figura 6.2: Diagramas para operação em carga mediana (60% de carga a 2600 rpm).</i>	89
<i>Figura 6.3: Diagramas para operação em plena carga (100% de carga a 3200 rpm).</i>	90
<i>Figura 6.4: Resultados para o ensaio dinamométrico em condições de baixa carga (40%).</i>	93
<i>Figura 6.5: Resultados para o ensaio dinamométrico em condições de carga mediana (60%).</i>	93
<i>Figura A.1: Diagramas para operação em baixa carga (40% de carga a 1400 rpm).</i>	106
<i>Figura A.2: Diagramas para operação em carga mediana (60% de carga a 2600 rpm).</i>	106
<i>Figura A.3: Diagramas para operação em plena carga (100% de carga a 3200 rpm).</i>	107

Lista de Tabelas

Tabela 6.1: Propriedades do diesel, ésteres metílico e etílico de soja e misturas de interesse.....	87
Tabela 6.2: Fórmulas empíricas dos combustíveis em estudo.	88
Tabela 6.3: Resultados obtidos para as proporções de massa queimada sob cada mecanismo.....	91
Tabela 6.4: Energia liberada pela combustão det. a partir da análise de liberação de energia.....	92
Tabela 6.5: Dados experimentais e fornecidos pelo modelo de liberação de energia.....	95

Nomenclatura

Letras Latinas

$[A]$	concentração molar da espécie A em mol/cm ³
C_p	calor específico a pressão constante da mistura de gases no cilindro
E	energia de ativação
f_{st}	relação mássica combustível-ar estequiométrica
\bar{g}_0	energia livre de Gibbs em base molar
h	entalpia da mistura de gases no interior do cilindro
$h_{f,l}$	entalpia associada ao combustível injetado, no estado líquido.
\bar{h}_i	entalpia em base molar do produto de combustão de índice i.
K_p	constante de equilíbrio químico
m	massa da mistura de gases ideais que se encontra no cilindro
m_a	massa de ar na mistura de gases que se encontra no cilindro
m_f	massa de combustível no cilindro
$m_{f,b}$	massa de combustível queimado que se encontra no cilindro
$m_{f,inj}$	massa de combustível injetada no cilindro
$m_{f,cycle}$	massa de combustível injetada por ciclo pelo dispositivo de injeção
M	massa molar da mistura de gases no cilindro
M_i	massa molar do produto de combustão de índice i
M_f	massa molar do combustível
n_{cyl}	número de cilindros do motor
p	pressão da mistura de gases
\bar{R}	constante universal dos gases
R	constante da mistura de gases presente no cilindro

$\bar{s}_{0,i}$	entropia específica em base molar do produto de combustão de índice i
T	temperatura da mistura de gases;
u	energia interna específica da mistura de gases presente no cilindro;
\bar{u}_i	energia interna específica em base molar do produto de combustão de índice i
V	volume no interior do cilindro
$x_{f,u}$	fração molar do combustível não queimado presente no fluido de trabalho
x_i	fração molar do produto de combustão de índice i no fluido de trabalho
x_{17}	número de moles de combustível queimado para cada mol de produtos

Letras Gregas

ζ	parâmetro de forma da função de Wiebe
ζ_p	parâmetro de forma da função de Wiebe associada ao estágio pré-misturado
ζ_d	parâmetro de forma da função de Wiebe associada ao estágio difusivo
χ	fração de combustível queimada até o instante corrente
χ_p	parâmetro de ajuste da fração de combustível queimada no estágio pré-misturado
χ_d	parâmetro de ajuste da fração de combustível queimada no estágio difusivo
θ	ângulo de manivela, expresso em graus a partir do ponto morto superior
θ_f	ângulo de término da injeção
θ_i	ângulo de início da injeção
θ_{bd}	ângulo de início da combustão difusiva
θ_{ig}	ângulo da ignição da mistura combustível
θ_z	ângulo de manivela correspondente a queima de 99% do combustível
$\Delta\theta_p$	duração da fase pré-misturada da combustão
$\Delta\theta_p$	duração da fase pré-misturada da combustão
$\Delta\theta_d$	duração da fase difusiva da combustão

Sobrescritos

—
◦ valor em base molar de uma grandeza
relativo ao estado de formação

Subscritos

0 relativo ao instante inicial de cálculo
a relativo ao ar
b relativo ao combustível queimado
cycle relativo a um ciclo do motor
cyl relativo aos cilindros do motor
d relativo à combustão difusiva
f relativo ao combustível ou ao término do processo de injeção
i relativo ao produto de combustão
bd relativo ao início da combustão difusiva
ig relativo à ignição
inj relativo à injeção de combustível
p relativo à combustão pré-misturada
u relativo ao combustível não queimado
z relativo à queima de 99% do combustível disponível

Capítulo 1

Introdução

O estudo do processo de combustão nos motores alternativos de ciclo diesel é uma área de intensa atividade de pesquisa, devido à extensão de sua utilização em praticamente todos os setores da economia. Em particular, pode-se mencionar que estes motores dominam as atuais aplicações de transporte de carga pesada e, além disso, constituem uma excelente alternativa para o desenvolvimento de veículos leves de transporte pessoal, possuindo reduzido consumo específico de combustível e baixo nível de emissões poluentes [1].

A complexidade dos fenômenos físico-químicos envolvidos na combustão nos motores de ignição por compressão, bem como a relativa ausência de modelos matemáticos concisos para sua descrição, torna interessante a utilização de métodos com forte apelo experimental durante a análise dos processos desencadeados nestas máquinas térmicas. Dentre estes métodos, destaca-se o estudo da combustão mediante a análise do histórico de liberação de energia, efetuado com base no levantamento de diagramas experimentais de pressão para o motor em questão. O Capítulo 2 do presente documento apresenta uma revisão, consideravelmente detalhada, dos conceitos envolvidos neste tipo de análise. Já no Capítulo 3, são apresentados modelos para a análise e simulação de motores de ciclo diesel, baseados nos conceitos expostos durante o Capítulo 2.

Uma apreciável discussão, encampando a determinação das propriedades termodinâmicas do fluido de trabalho em modelos termodinâmicos, encontra-se disponível no Capítulo 4 do presente documento. Já o tratamento numérico dispensado aos diagramas experimentais de pressão, que possui influência marcante na confiabilidade dos resultados obtidos durante estudos de liberação de energia, é explanado durante o Capítulo 5 deste trabalho.

A partir da primeira crise de energia, ocorrida em 1973, diversas alternativas têm sido estudadas com o objetivo de se substituir os combustíveis fósseis como único insumo energético para os motores de combustão interna [2, 3, 4, 5, 6, 7]. Neste âmbito, a adição de combustíveis alternativos como o biodiesel (ésteres etílicos de soja) ao óleo diesel, através de misturas parciais, pode ajudar o Brasil a reduzir sua demanda por petróleo, sem que se necessite modificar os veículos que irão utilizar tais misturas. Esta adição pode ainda contribuir na redução da emissão de CO₂, um dos causadores do efeito estufa, bem como amenizar os riscos associados com a poluição do ar nos grandes centros urbanos. Todavia, as possibilidades abertas com a utilização de tais misturas nas regiões mais remotas do país são ainda mais atraentes, pois o elevado custo do transporte encarece os produtos derivados de petróleo nestas localidades.

No Capítulo 6 apresentam-se estudos, baseados no método de análise de liberação de energia, possibilitando a compreensão do mecanismo de queima das misturas combustíveis mencionadas acima, fornecendo-se assim maior embasamento teórico para sua correta aplicação. Algumas conclusões e considerações finais são apresentadas durante o Capítulo 7.

Capítulo 2

A Taxa Aparente de Liberação de Energia

2.1 A liberação de energia em um motor de ciclo diesel

A composição do fluido de trabalho contido no cilindro do motor varia no espaço e no tempo. Para um motor de ignição por compressão e injeção direta o combustível é injetado no estado líquido, quando o pistão se aproxima do ponto morto superior, distribuindo-se através de um ou mais jatos pela câmara de combustão. A dispersão do combustível, sua mistura com o ar, evaporação e difusão, produzem uma mistura gasosa entre combustível e ar, desencadeando reações químicas capazes de queimar este combustível. Tais fenômenos devem ser obtidos em um pequeno período de tempo, pois do contrário a eficiência do motor em questão pode ser comprometida. Assim, um motor que opere a 2000 rpm terá em torno de 5 ms para que todos estes eventos ocorram [1]. Pode-se, através destes breves comentários, antever a complexidade e a natureza altamente transitória dos fenômenos físicos e químicos ocorrentes em um motor diesel, além de sua influência quanto ao desempenho otimizado deste motor.

Uma das maneiras tradicionalmente utilizadas para se compreender e analisar os eventos citados acima é a análise do histórico da liberação de energia [1], efetuada através da análise experimental da queima do combustível no motor em estudo. Pode-se definir a taxa na qual a energia será liberada no interior do cilindro do motor, taxa aparente de liberação de energia, através da multiplicação da taxa com que o combustível é queimado, taxa aparente de queima do combustível, pelo conteúdo energético deste combustível.

É conveniente denominar as taxas definidas acima como aparentes, tendo-se em vista que fatores estranhos a combustão propriamente dita, como a evaporação do combustível injetado ou os efeitos da consideração de homogeneidade na carga do cilindro, serão englobados pela taxa aparente de queima. O caráter com que tais fatores influenciarão estas taxas será apresentado detalhadamente, em itens posteriores deste trabalho.

Através da análise de imagens obtidas do interior de motores [8, 9] e dados referentes a pressão no cilindro, pôde-se ao longo do tempo mapear os principais fenômenos envolvidos na combustão em motores diesel de injeção direta. Uma seqüência de trabalhos de grande relevância para a identificação destes fenômenos, e a influência de estudos baseados na taxa de liberação de energia em sua caracterização, será apresentada a seguir.

2.1.1 A identificação dos processos ocorrentes durante a combustão

Uma equação semi-empírica para a duração do atraso da ignição em motores diesel foi proposta inicialmente por Wolfer [10], relacionando a pressão e a temperatura médias do fluido de trabalho com a duração desta etapa do processo de combustão.

Utilizando gráficos triangulares e retangulares para representar a taxa de liberação de energia, Lyn [11] verificou a pronunciada influência da morfologia destes gráficos sob a taxa de elevação da pressão e sob a pressão máxima obtida durante um ciclo. Demonstrou-se, portanto, que a taxa de liberação de energia influenciava marcadamente a eficiência de um motor.

Visando a obtenção de curvas otimizadas para a taxa de injeção de combustível em motores diesel, Austen e Lyn [12] estudaram várias curvas de liberação de energia construídas através de diagramas experimentais de pressão. A partir da análise destas curvas, estes autores acabaram por identificar os mecanismos pré-misturado e difusivo da combustão. Utilizando um extenso estudo fotográfico da combustão em motores de ignição por compressão, Alcock e Scott [9] mostraram que a maior parte da combustão ocorre com intensa luminosidade, como é característico nas chamas difusivas. Desta maneira evidenciou-se que, em condições normais de operação, a maior parte da energia é liberada pela queima difusiva em um motor diesel.

Posteriormente, Krieger e Borman [13] propuseram o cálculo da taxa aparente de liberação de energia a partir da aplicação de um modelo termodinâmico de uma zona de combustão. O esquema proposto neste trabalho ainda é substancialmente utilizado, durante o processamento de dados experimentais para a pressão no interior do cilindro, com o intuito de se determinar curvas para a taxa aparente de liberação de energia.

Algumas considerações a respeito dos fenômenos identificados nos trabalhos citados acima, e uma breve descrição dos processos que os envolvem, serão apresentadas no item a seguir.

2.1.2 Uma breve descrição dos processos ocorrentes durante a combustão

O combustível adentra o sistema em estudo através do bico injetor, a alta pressão, sendo seus jatos dirigidos para a câmara de combustão. Produz-se assim uma rápida injeção através de um orifício com pequena área transversal, gerando-se um jato de elevada velocidade relativa ao fluido de trabalho que já se encontrava no sistema. Devido a esta alta velocidade, o jato de combustível se desintegrará rapidamente em gotículas, formando um spray.

Este spray, juntamente com o escoamento do ar presente no cilindro, determinará a distribuição do combustível no interior da câmara de combustão. Deve-se salientar que os processos mencionados acima são concomitantes. Conforme o combustível e o ar misturam-se e são aquecidos, a taxa de ocorrência das reações químicas de pré-chama no fluido de trabalho começa a aumentar gradualmente. Em um dado momento, este processo formará os primeiros focos da combustão. Durante o estudo da combustão em motores de ciclo diesel, dá-se a denominação de atraso da ignição ao conjunto de fenômenos físico-químicos que se iniciam com a injeção de combustível, terminando com sua ignição.

Pode-se dividir o atraso da ignição em uma parcela física e outra química. A parcela física ocorrerá devido a necessidade de quebra do jato de combustível em gotículas, seu aquecimento e subsequente vaporização, além de sua combinação com o ar presente na câmara de combustão. A parcela química representa o período de tempo, concomitante com a parcela física, no qual as taxas de ocorrência das reações de oxidação do combustível são muito lentas, e quase imperceptíveis.

Durante a construção de um diagrama de liberação de energia, esperam-se valores negativos para a taxa de queima no transcorrer de todo o atraso da ignição. Isto advém da absorção de energia do sistema pelos processos de atomização e de vaporização do combustível injetado, além da ocorrência de reações endotérmicas que antecedem o surgimento dos primeiros focos de combustão. Todos estes fenômenos, caracterizados pela absorção de energia pelo fluido de trabalho, serão computados por modelos de uma zona de combustão, portanto, como uma liberação negativa de energia, conforme indicado pela Figura 2.1.

Obviamente, os processos subseqüentes ao atraso da ignição são fortemente influenciados pelo tempo transcorrido e pelos fenômenos físico-químicos característicos desta fase da combustão. Desta maneira justifica-se a importância dada a seu tratamento criterioso no presente trabalho, durante a formulação de modelos matemáticos de uma zona de combustão.

Até que ocorram os primeiros focos de queima, uma parte considerável do combustível já injetado estará dentro dos limites de inflamabilidade, encontrando-se aquecida, vaporizada e misturada com o ar através da ação dos processos descritos acima. Frentes de chama, originárias dos primeiros focos de ignição, percorrerão rapidamente esta mistura pronta para entrar em combustão. A velocidade destas frentes é controlada pela cinética das reações em cadeia, que caracterizam a queima de uma mistura homogênea. Este é o mecanismo pré-misturado da combustão. A liberação de energia durante esta etapa do processo de queima é consideravelmente abrupta. Espera-se que durante a queima pré-misturada, relativamente à queima difusiva, seja emitida pouca radiação e forme-se pouco carbono (particulados) [8, 9].

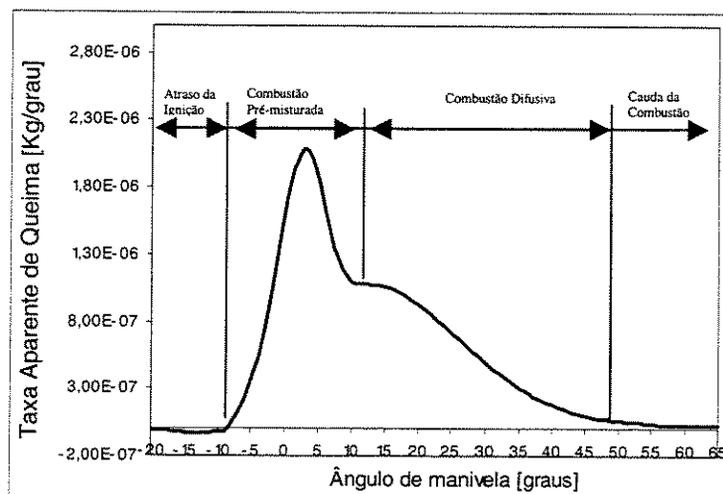


Figura 2.1: Diagrama típico de taxa aparente de queima.

Uma vez consumida a mistura previamente preparada, ou dentro dos limites de inflamabilidade, a taxa com que a combustão ocorre começará diminuir rapidamente, estabilizando-se a níveis ditados pela razão com que o combustível ingressante no sistema é submetido as condições de queima. Desta forma a liberação de energia deixa de ser governada pela cinética química, sendo influenciada fortemente pela velocidade de evaporação do combustível, pela difusão de seus vapores e pela quantidade de oxigênio disponível para a reação de queima. Este é o mecanismo difusivo da combustão, que ocorre concorrentemente ao pré-misturado.

Após o término da injeção de combustível no sistema, a combustão continua a uma taxa decrescente, conforme o combustível e o oxigênio presentes no fluido de trabalho são consumidos. O estágio da combustão no qual os reagentes tornam-se escassos e a liberação de energia inexpressiva, é denominado cauda da combustão, e pode perdurar até a abertura da válvula, ou válvulas, de escape. Durante a cauda da combustão a queima também ocorrerá predominantemente através do mecanismo difusivo. Nestas duas últimas fases da combustão esperam-se grande produção e queima de particulados, além de elevada troca térmica por radiação.

Graças a esta dependência da combustão em motores diesel pela disponibilidade de oxigênio, pode-se demandar excesso de ar de até 50% [1] para que boa eficiência e baixo nível de emissão de particulados sejam alcançados.

2.2 O levantamento da taxa aparente de liberação de energia

Pode-se determinar a taxa com que a energia, ou o calor, é liberado em um motor de combustão interna considerando-se diretamente todos os fenômenos descritos anteriormente, através do emprego de um modelo de simulação multidimensional. Conforme será mencionado em capítulos posteriores, os modelos multidimensionais fornecem, além da taxa aparente de liberação de energia, resultados para o escoamento turbulento bifásico e para a distribuição dos elementos químicos no interior do cilindro [14]. Assim, disponibiliza-se uma análise aprofundada da dispersão do spray formado durante a injeção, da ignição da mistura combustível compondo as primeiras frentes de chama, e do campo de temperaturas e velocidades no interior do cilindro, possibilitando-se uma visão intensiva dos fenômenos citados anteriormente.

Felizmente, a determinação da taxa de liberação de energia pode ser feita através da consideração indireta dos complexos fenômenos envolvidos na combustão, empregando-se um modelo termodinâmico de uma zona de combustão, chamado neste trabalho de modelo de liberação de energia. Este modelo é consideravelmente mais simples que os modelos multidimensionais, além de não exigir ajustes de parâmetros de natureza essencialmente empírica, presentes nos esquemas de várias zonas de combustão. O custo desta solução simplificada é a perda da descrição espacial dos processos ocorrentes no motor, além da necessidade de dados experimentais para a pressão média no interior da câmara de combustão.

A preocupação com a distribuição da concentração das espécies químicas consideradas, da temperatura e do campo de velocidades é revogada, através da adoção da hipótese de que a carga do cilindro seja uma mistura uniforme, ou homogênea. Desta forma tem-se uma única temperatura, pressão e concentração para cada substância química em toda a zona de combustão, que podem ser interpretadas como os valores médios destas variáveis presentes na aplicação do modelo matemático em estudo.

Deve-se salientar que a taxa com a qual o combustível está sendo queimado no sistema descrito acima não possui relação alguma, de forma direta, com a taxa de injeção de combustível. Segundo Ramos [14], pode-se considerar uma única relação indireta entre a taxa de injeção e a taxa aparente de queima do combustível: A massa total de combustível injetado e a massa total de combustível queimada, prevista pela integração da taxa aparente de queima do combustível, deverão ser coincidentes com o motor operando em regime permanente.

A utilização de técnicas de análise baseadas em modelos de uma zona de combustão em motores diesel possui vasta documentação. Conforme se mencionou, Krieger e Borman [13] propuseram um método para o cálculo da taxa aparente de liberação de energia incluindo efeitos da dissociação dos produtos de combustão e da transferência de calor através das paredes do cilindro, cuja essência permanece sendo a mais utilizada para este propósito. Gatowski e co-autores [15] acrescentaram a esta análise os efeitos do escoamento nas folgas presentes no interior do cilindro. Rakopoulos e Hountalas [16] estimaram a taxa total de transferência de calor durante a combustão, utilizando a determinação experimental da taxa aparente de liberação de calor associada a diversos modelos de transferência de calor.

No presente trabalho será apresentado um modelo, voltado à determinação experimental da taxa aparente de liberação de energia, que considera a presença de combustível não reagido no fluido de trabalho, cinética química para alguns dos produtos de combustão, além de separar convenientemente o processo de injeção da queima aparente do combustível.

2.2.1 A hipótese de homogeneidade da carga do cilindro

Tradicionalmente, a hipótese de que o fluido de trabalho se comporte de maneira homogênea tem sido utilizada durante o levantamento da taxa aparente de queima baseada no tratamento de dados experimentais para pressão [1]. Não obstante a qualidade inegável dos resultados obtidos sob tal hipótese, ela vem sendo justificada de maneira conceitualmente equivocada, com base na expectativa de que elevada taxa de mistura, presente nos motores de ciclo diesel modernos, venha a formar uma mistura quase homogênea no interior de seus cilindros.

Apesar deste elevado grau de mistura, a heterogeneidade do fluido de trabalho nos motores diesel é considerável, e de elevada importância durante a descrição do processo de combustão. Tendo-se reconhecido a heterogeneidade de fluido de trabalho, deve-se conceber uma aproximação para seu comportamento que englobe a influência dos diversos fenômenos esparsos desencadeados durante a combustão. Embora o modelo de liberação de energia não compute diretamente a complexa preparação da mistura combustível no motor, característica da fase difusiva da combustão [17], tampouco a cinética química da queima de misturas homogêneas, que irá governar a etapa pré-misturada, sua formulação irá mensurar indiretamente a queima ocorrente em ambas as etapas. Esta mensuração se efetuará com base na interpretação da influência da queima do combustível na curva experimental de pressão, através da aplicação da primeira lei da termodinâmica.

Desta forma, considera-se que o comportamento global ditado pela soma das influências dos diversos mecanismos de queima ocorrentes no cilindro, descritos anteriormente, seja bem aproximado pela cinética química de combustão determinada através da aplicação da primeira lei da termodinâmica a um sistema homogêneo, submetido às condições médias de temperatura, pressão e concentração de combustível presentes no cilindro do motor real. Deve-se salientar que a pressão média no interior do cilindro e seu volume serão levantados de maneira experimental, durante testes em bancada, posteriormente alimentando o modelo de liberação de energia.

Conforme se verificará adiante, a excelente concordância entre a massa de combustível queimada prevista por este modelo e pelo consumo de combustível do motor, mensurado durante os ensaios em bancada, confere certa segurança quanto a adoção da hipótese de homogeneidade da carga do cilindro.

2.2.2 A hipótese de queima instantânea do combustível

Nos modelos termodinâmicos de uma zona de combustão, para motores de ignição por compressão, é usual assumir-se que o combustível injetado queimará imediatamente ao adentrar a câmara de combustão [13, 14, 15], formando-se assim uma mistura em equilíbrio químico de gases ideais, composta pelos produtos de combustão e ar presentes no fluido de trabalho. Desta forma, o efeito da presença de combustível não queimado na composição química do fluido de trabalho não será levado em conta nestes modelos.

Em uma tentativa de melhorar a representação do fluido de trabalho, e de suas propriedades termodinâmicas, optou-se pela separação da porção queimada e não queimada do combustível presente na câmara de combustão. Disponibilizou-se desta maneira o conhecimento, de forma direta, da quantidade de combustível que já havia reagido em cada instante das simulações, conforme se acompanha na Figura 2.2 para o regime de operação correspondente a Figura 2.1.

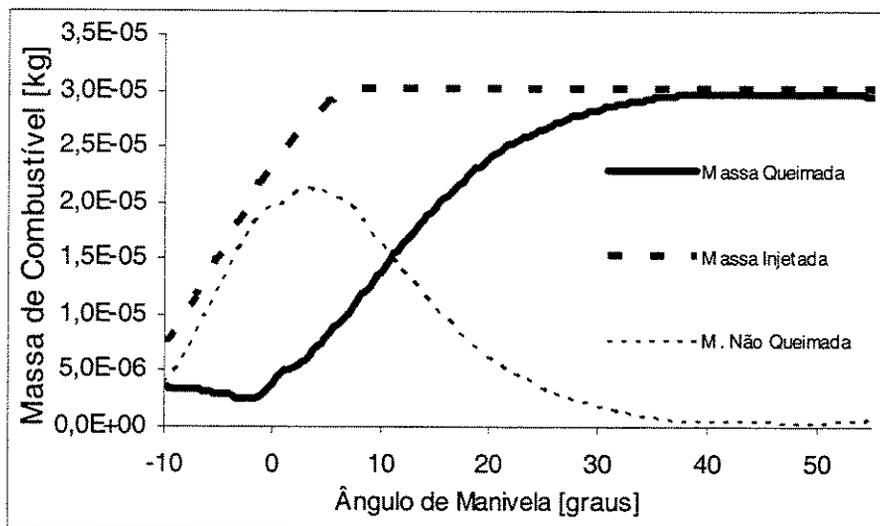


Figura 2.2: Massas de combustível queimado e não reagido presente no sistema.

Outro argumento para o abandono da hipótese de queima instantânea é a associação entre o processo de queima de combustível a sua injeção, promovida por sua utilização. Tal associação fará com que se estime erroneamente o fluxo de massa nas fronteiras do sistema em estudo e, por conseguinte, o fluxo de entalpia e o acréscimo de energia interna acarretado pelo fluxo de massa (ver Capítulo 3). Este equívoco reside no distanciamento entre a taxa aparente de queima de combustível, adotada sob tal hipótese como a taxa de influxo de massa no sistema, e a taxa de injeção de combustível, que representa o valor real deste influxo. Através da separação entre os processos de injeção e queima, propiciado pelo abandono da hipótese de queima instantânea do combustível injetado, pode-se utilizar diretamente a taxa de injeção como o fluxo de massa nas fronteiras do sistema, evitando-se estes inconvenientes.

Na Figura 2.3 são apresentados diagramas de liberação de energia, histórico de queima do combustível injetado e de temperatura média do fluido de trabalho, para a operação do motor MWM 6.07T GMT 400 com óleo diesel N° 2. Constam nestes diagramas dados obtidos pela aplicação de modelos de liberação de energia, considerando-se a hipótese de queima instantânea do combustível injetado e separando-se os processos de injeção e queima, através do computo da parcela de combustível não queimado no fluido de trabalho. As massas totais de combustível injetado, presentes nos diagramas de histórico de queima da Figura 2.3, foram determinadas experimentalmente. Já as taxas de injeção, utilizadas na construção das curvas de massa total de combustível na mistura, foram estimadas a partir de um modelo descrito no Capítulo 3.

Observam-se nesta figura algumas tendências, independentes do regime de operação do motor, ocasionadas pelo abandono da hipótese de queima instantânea em favor da separação entre os processos de injeção e queima. A primeira delas seria o acréscimo na temperatura da mistura de gases no cilindro prevista para boa parte da fase difusiva e para a cauda da combustão, acompanhada de um leve decréscimo durante a fase pré-misturada e o início da fase difusiva. A taxa de liberação de energia apresenta comportamento semelhante ao descrito acima para a temperatura da carga. Isto acarreta um acréscimo na massa de combustível queimada prevista pelo modelo com separação entre queima e injeção, frente a adoção da hipótese de queima instantânea. Nos casos apresentados pela Figura 2.3 este acréscimo foi, em média, de 7,08 pontos percentuais.

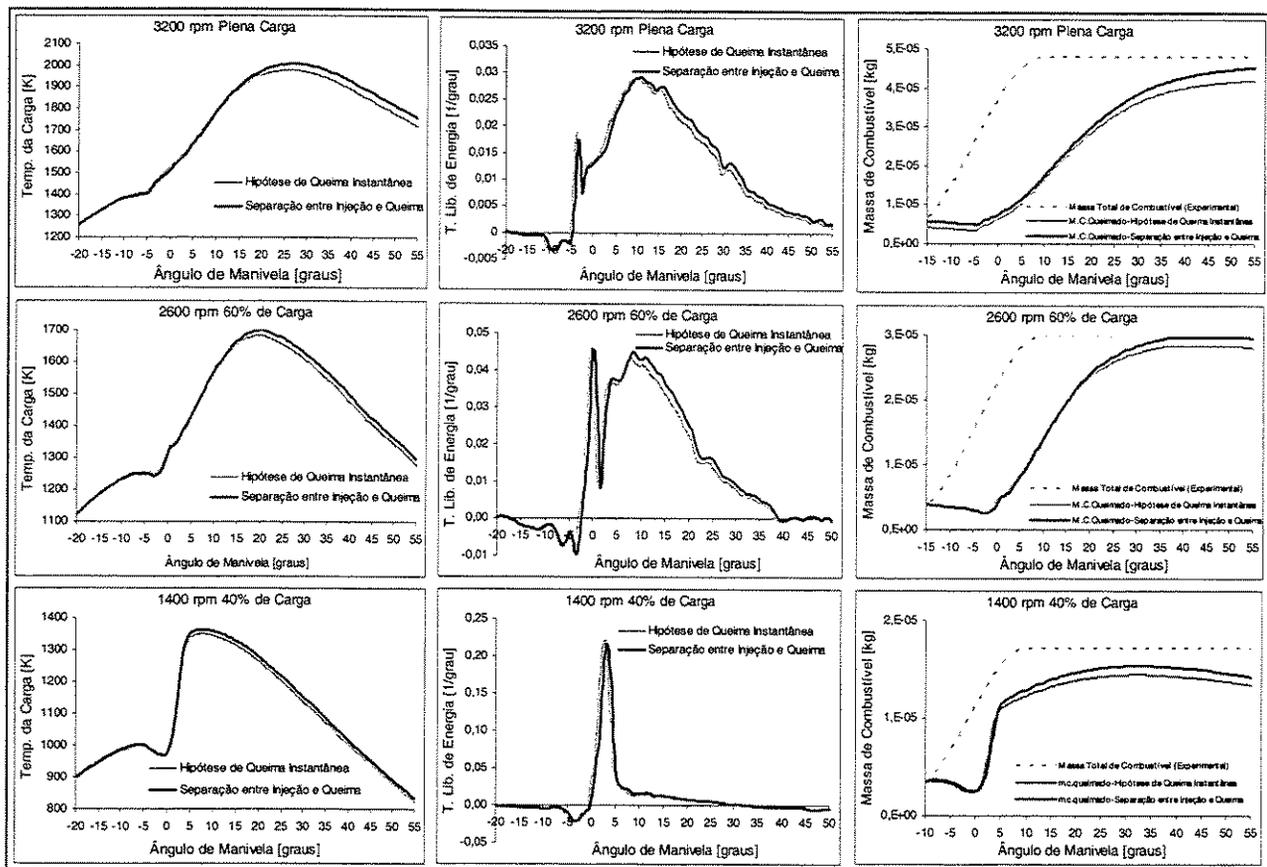


Figura 2.3.: Comparação entre as abordagens de aplicação do modelo de liberação de energia.

Na Figura 2.4 são apresentados valores para alguns dos termos presentes em um balanço de primeira lei para o sistema em estudo, considerando-se a operação do motor com óleo diesel N° 2 a 2600 rpm e 60% de carga. Pode-se constatar nesta figura a ordem de grandeza dos termos relacionados ao processo de injeção, para os casos de adoção da hipótese de queima instantânea e para a separação entre a queima e a injeção, frente ao termo correspondente a taxa com o qual o sistema cede calor por suas fronteiras. Nota-se que os termos relacionados à injeção mostram-se reduzidos, porém não desprezíveis, frente ao calor cedido.

Durante a maior parte do processo de injeção, situado entre os ângulos de manivela de -20 e 10° para o caso ilustrado na Figura 2.4, o modelo baseado na queima instantânea do combustível considera nulo, ou até mesmo negativo, o fluxo de massa nas fronteiras do sistema. Já o modelo baseado na separação entre injeção e queima utilizou valores realistas para este fluxo durante o processo de injeção. Esta discordância gera o relatado acréscimo nos dados de liberação de energia e temperatura para o período de injeção, mediante a adoção da hipótese de queima instantânea.

Após o término do processo de injeção, o modelo concebido sob tal hipótese irá prever valores consideravelmente altos para o influxo de massa no sistema, quando na realidade este influxo é nulo. Isto acarreta a redução nos valores dos dados de liberação de energia e de temperatura do fluido de trabalho calculados pelo modelo de queima instantânea, conforme se observa na Figura 2.3.

Durante o início da compressão e a cauda da combustão, instantes nos quais a taxa de injeção é nula e a de queima é próxima de zero, observa-se a esperada proximidade entre os valores da taxa de liberação de energia previstos pelas abordagens em estudo.

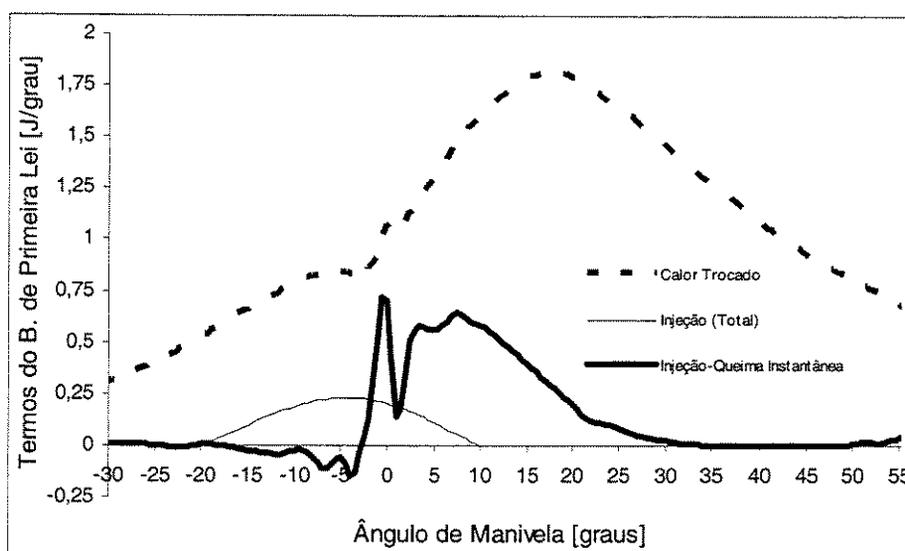


Figura 2.4: Influência do processo de injeção durante a análise de primeira lei.

As discrepâncias indicadas na Figura 2.3 entre a massa total de combustível presente no cilindro, levantada experimentalmente, e as massas de combustível queimadas até a abertura da válvula de escape, previstas através de cada um dos modelos de liberação de energia, mostram-se bastante favoráveis a abordagem com separação entre os processos de injeção e queima. Todavia, para se levantar precisamente a exatidão desta abordagem, seria necessário ainda o conhecimento da massa de hidrocarbonetos não queimados presentes ao final do processo de combustão.

Sob este ponto de vista, a separação entre os fenômenos de queima e injeção do combustível deverá propiciar diagramas de liberação de energia com maior qualidade, frente a adoção da hipótese de queima instantânea do combustível, motivando o autor a relevar esta hipótese durante as análises que seguem.

2.2.3 Os efeitos da cinética química de pré-chama e da preparação da mistura combustível

Conforme será descrito no Capítulo 4, o esquema de equilíbrio parcial, utilizado na caracterização da composição do fluido de trabalho, considerou de elevada velocidade as reações químicas envolvendo os produtos da oxidação do combustível sob a presença de ar.

Todavia, no transcorrer da fase de atraso da ignição, reações endotérmicas que antecedem o surgimento dos primeiros focos de combustão irão absorver energia do sistema em estudo. Some-se a isto a energia absorvida durante a parcela física do atraso da ignição, através da quebra em gotículas do jato combustível, seguida pelo seu aquecimento e vaporização. Comentou-se que esta absorção irá causar valores negativos para a taxa aparente de queima do combustível, que felizmente são amortecidos durante a sua integração para a determinação da relação de equivalência entre combustível queimado e ar (ver Capítulo 3).

Embora a caracterização da fase de atraso da ignição seja interessante durante a construção de uma curva de liberação de energia, a taxa negativa de queima nesta etapa da combustão representa apenas a extração de energia do sistema citada acima, e não a destruição de uma parcela da massa de combustível queimada. Portanto, caso a influência da taxa negativa de queima sob a relação de equivalência fosse mais pronunciada, causando alterações substantivas na relação de equivalência entre combustível queimado e ar (ϕ_b) durante as simulações, ela se tornaria um sério inconveniente. A Figura 2.5 ilustra o grau de influência típico desta absorção de energia sobre a relação de equivalência adimensional entre combustível queimado e ar.

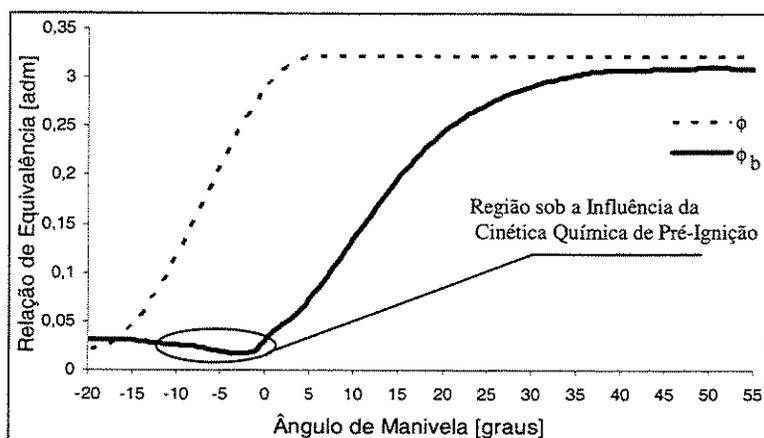


Figura 2.5 - Influência da cinética de pré-ignição na taxa de equivalência ϕ_b .

Com o intuito de obter a taxa aparente de liberação de energia, Li e co-autores [18] utilizaram o modelo de cinética química reduzida de Hu e Keck [19], associado a um modelo termodinâmico de uma zona de combustão. As taxas de liberação de energia obtidas por este esquema mostraram-se demasiadamente bruscas durante o início da combustão, sendo toda a liberação de energia efetuada precocemente. A massa de combustível queimada prevista por esta abordagem é duas vezes maior que a verificada experimentalmente. Apesar da obtenção de resultados incoerentes, este trabalho demonstra a possibilidade de emprego de esquemas que levem em conta a influência da cinética química de pré-ignição, durante a concepção de modelos para a averiguação da taxa de liberação de energia.

2.3 A interpolação das curvas de taxa aparente de queima

Muitas vezes a distinção entre os mecanismos pré-misturado e difusivo da combustão não se faz tão óbvia quanto observado na curva apresentada na Figura 2.1. Surge então a necessidade de algum critério, que não o visual, para separar as parcelas pré-misturada e difusiva da combustão, expressas nas curvas experimentais de taxa aparente de queima.

Baseando-se na teoria das reações em cadeia proposta por Semenov [20], a qual explica a combustão de misturas homogêneas, Wiebe [21] deduziu uma expressão semi-empírica para a taxa de liberação de energia, sugerindo que ela fosse aplicada em motores diesel. Na dedução desta expressão Wiebe admitiu que a taxa de combustão é proporcional a velocidade de formação de radicais ativos, e que a taxa de geração destes radicais é proporcional à duração da combustão elevada a um expoente a ser determinado. A função proposta por Wiebe é dada por:

$$\chi = 1 - \exp \left[-6,908 \cdot \left(\frac{\theta - \theta_{ig}}{\theta_z - \theta_{ig}} \right)^{\zeta+1} \right]$$

sendo

- χ fração de combustível queimado até o instante corrente;
- θ_{ig} ângulo de manivela correspondente ao início da injeção;
- θ_z ângulo de manivela correspondente a queima de 99% do combustível;
- ζ parâmetro de forma da função de Wiebe.

A fórmula de Wiebe expressa formalmente a cinética de combustão em misturas homogêneas combustível-ar, por isso ela adequa-se apenas a motores com formação externa de mistura. Desta maneira, ela é incapaz de representar a queima em dois estágios ocorrente nos motores diesel.

Percebendo que com apenas uma função de Wiebe não seria possível representar a liberação de energia nestes motores, Watson e co-autores [22] propuseram a utilização de duas funções, uma representando o estágio pré-misturado e outra a combustão difusiva. As curvas de liberação de energia apresentadas por estes autores, calculadas a partir de diagramas experimentais de pressão, foram muito bem representadas por duas funções de Wiebe [21].

Baseando-se nestas constatações, propôs-se a seguinte representação para a taxa de queima:

$$\frac{dm_{f,b}}{d\theta} = 6,908 \cdot \chi_p \cdot \frac{\zeta_p + 1}{\Delta\theta_p} \cdot \left(\frac{\theta - \theta_{ig}}{\Delta\theta_p}\right)^{\zeta_p} \cdot \exp\left[-6,908 \cdot \left(\frac{\theta - \theta_{ig}}{\Delta\theta_p}\right)^{\zeta_p + 1}\right] + 6,908 \cdot \chi_d \cdot \frac{\zeta_d + 1}{\Delta\theta_d} \cdot \left(\frac{\theta - \theta_{bd}}{\Delta\theta_d}\right)^{\zeta_d} \cdot \exp\left[-6,908 \cdot \left(\frac{\theta - \theta_{bd}}{\Delta\theta_d}\right)^{\zeta_d + 1}\right] \quad (2.1)$$

sendo

- χ_p parâmetro de ajuste da fração de combustível queimado no estágio pré-misturado;
- χ_d parâmetro de ajuste da fração de combustível queimado no estágio difusivo;
- θ_{ig} ângulo da ignição da mistura combustível;
- θ_{bd} ângulo de início da combustão difusiva;
- $\Delta\theta_p$ duração da 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 função de Wiebe associada ao estágio pré-misturado;
- ζ_d parâmetro de forma da função de Wiebe associada ao estágio difusivo.

Durante o ajuste das curvas de taxa aparente de queima os valores dos parâmetros ζ_p e ζ_d relatados por Miyamoto e co-autores [23] foram tomados como referência inicial. As durações dos mecanismos pré-misturado e difusivo da combustão, expressas por $\Delta\theta_p$ e $\Delta\theta_d$, foram retiradas diretamente das curvas experimentais de taxa de queima. Para a duração da etapa pré-misturada, representada por $\Delta\theta_p$, utilizou-se o dobro da diferença entre o ângulo de máxima taxa de queima e o de início da combustão. Para a duração da etapa difusiva, representada por $\Delta\theta_d$, utilizou-se a diferença entre o ângulo de queima de 99% do combustível e o de início da combustão difusiva.

Os valores dos parâmetros de ajuste χ_p e χ_d foram obtidos através da aproximação das curvas experimentais de liberação de energia pela Equação 2.1, utilizando-se o método dos mínimos quadrados [24]. Alguns exemplos de ajuste de diagramas de liberação de energia podem ser encontrados no Apêndice A.

Tendo sido concebida com base na combustão de misturas homogêneas, a função de Wiebe pode ser tratada como uma correlação semi-empírica para a taxa aparente de combustão pré-misturada. Porém a Equação 2.1 também utiliza uma função de Wiebe para aproximar a taxa de queima durante a etapa difusiva. Mencionou-se que esta etapa da combustão não é governada pelas leis da queima de misturas homogêneas e desta forma esta equação torna-se uma correlação meramente empírica [23, 25].

Obviamente, a combustão difusiva presente nos motores reais não será governada pela cinética das reações em cadeia, como na queima de uma mistura homogênea. Todavia, durante o início da fase predominantemente difusiva da combustão a taxa de queima aumentará de forma gradual, devido ao acréscimo da taxa de preparação. Na medida que a queima transcorre o oxigênio torna-se mais escasso na câmara de combustão, causando um decréscimo na taxa de queima, até que esta se torne inexpressiva. Resultados atestando tal comportamento podem ser observados no trabalho de Whitehouse e Way [26], baseado na dependência do oxigênio para a preparação da mistura combustível.

Portanto, uma função de Wiebe também pode prever o comportamento da taxa de queima difusiva em motores diesel, pois morfológicamente ele se assemelha muito ao da queima de uma mistura homogênea, porém neste caso tal função será uma correlação com caráter meramente empírico.

Estas observações reiteram o considerável sucesso obtido por Miyamoto e co-autores [23] durante a interpolação de curvas para a liberação de energia, atestando que a função de Wiebe constitui uma boa aproximação até mesmo para a queima difusiva.

2.4 Modelos preditivos de uma zona de combustão

As hipóteses e o modelamento geral abordado na descrição do esquema de liberação de energia podem ser aplicados com o propósito de se determinar a curva de pressão média de um motor, com o conhecimento prévio de seu diagrama de liberação de energia. O modelo destinado a esta determinação será chamado, neste trabalho, de modelo preditivo. Da mesma forma que o esquema de liberação de energia, este modelo possui vasta documentação [14].

A intenção de se conhecer a curva de pressão média no cilindro de um motor reside no fato de que ela fornece subsídios diretos para a avaliação da produção de trabalho pelo sistema em estudo. Desta forma podem-se, por exemplo, realizar estudos sobre a influência de diversos parâmetros como a taxa de compressão, o curso do pistão, ou o volume da câmara de combustão no desempenho deste motor.

Todavia, o conhecimento prévio do comportamento da taxa de liberação de energia ocorrente em um motor diesel, nos diversos regimes de trabalho aos quais ele será exposto durante sua utilização, não é uma tarefa fácil. Miyamoto e co-autores [23] obtiveram subsídios para o comportamento de curvas para a liberação de energia, empregando uma função dupla de Wiebe, para uma ampla gama de regimes de operação com um motor de injeção direta e outro de injeção indireta. Este trabalho consiste, sem dúvida alguma, na melhor fonte disponível para a obtenção de dados para a taxa aparente de liberação de energia em motores diesel.

Embora a taxa aparente de liberação de energia possa ser estimada pela publicação citada acima, fatores como a taxa de compressão, a geometria da câmara de combustão, além das condições de temperatura e pressão do fluido de trabalho durante o início da injeção influenciam, de maneira notória, o próprio comportamento da liberação de energia. Torna-se, portanto, imprevisível a imprecisão causada pelo translado de dados para a liberação de energia de um motor a outro.

Isto dificulta substancialmente a obtenção de resultados de elevada confiabilidade para estudos paramétricos com o modelo preditivo de uma zona de combustão. Por esta razão emprega-se este modelo, no presente trabalho, apenas quando os parâmetros de liberação de energia refletem, de maneira segura porém redundante, dados experimentais levantados para o motor e regime de operação a serem simulados.

Capítulo 3

Modelos de Uma Zona de Combustão

O desenvolvimento dos dois modelos termodinâmicos para a simulação dos processos ocorrentes durante a combustão em motores diesel, apresentados no capítulo 2, será exposto a seguir.

3.1 Obtenção de um modelo de liberação de energia

Conforme discutido, neste trabalho será utilizado um modelo computacional de uma zona de combustão para a obtenção da taxa aparente de liberação de energia, a partir dos dados experimentais de pressão. Este modelo considera a carga do cilindro como uma mistura uniforme de gases ideais, composta exclusivamente por ar, combustível não reagido e produtos de combustão. Tal mistura encontra-se em equilíbrio termodinâmico parcial e em condições uniformes de temperatura, pressão e razão de equivalência entre combustível e ar, ajustadas a cada instante da simulação, por razões também já comentadas.

A adição de combustível a esta carga durante o processo de combustão se dá de maneira gradual, sendo o mesmo injetado em estado líquido, vaporizando-se no instante em que entra no sistema em estudo. Desta forma o combustível não queimado se comportará como mais um constituinte da mistura uniforme de gases ideais que compõe a carga do cilindro. Assim, fenômenos como gradientes de pressão, gradientes de temperatura, gradientes de concentração, cinética química, vaporização gradual de combustível, mistura entre combustível e ar e o escoamento no interior do cilindro não serão levados em conta, de maneira direta, por este modelo.

Devido à abdicação da hipótese de que todo o combustível presente no fluido de trabalho se encontrasse queimado, a massa e combustível injetada e a taxa de injeção a cada instante da simulação serão parâmetros necessários durante a obtenção das curvas de liberação de energia.

Com este escopo, propôs-se o cálculo da taxa de injeção através da aproximação por uma função senoidal, variando-se seu ângulo de zero a π . Este comportamento baseou-se na observação da morfologia de curvas para a taxa de injeção reportadas na literatura, em estudos que utilizaram dispositivos de injeção acionados mecanicamente [27, 28, 29]. Caso se deseje simular a taxa de injeção de um dispositivo acionado eletronicamente, convém considerar a taxa de injeção constante, acompanhando as morfologias apresentadas na literatura [29, 30].

Admitiu-se que o combustível cruzará as fronteiras delimitadas pelo sistema formado pelo cilindro, pistão e cabeçote no estado líquido, vaporizando-se imediatamente. De fato, alguns estudos comprovam a existência de um núcleo de combustível líquido com comprimento finito nos jatos formados na câmara de combustão, em motores diesel [27, 31]. Desta maneira a quantidade de combustível líquido presente no jato, ou spray, após cerca de 1 ms do início da injeção permanecerá constante, representando cerca de 5% da massa total de combustível no jato [27, 31]. Portanto, pode-se afirmar que a injeção adicional de combustível irá equivaler a uma fonte de um jato gasoso [27, 31]. Este comportamento explica o sucesso de modelos fenomenológicos baseados em um jato gasoso de combustível [28, 32, 33].

Assim, a taxa de injeção de combustível, e a massa total de combustível injetada a cada instante da simulação foram aproximadas pelas duas equações que seguem.

$$m_{f, inj} = \frac{m_{f, cycle}}{2 \cdot n_{cil}} \left(1 - \cos \left(\pi \cdot \frac{\theta - \theta_i}{\theta_f - \theta_i} \right) \right) \quad (3.1)$$

$$\frac{d}{d\theta}(m_{f,inj}) = \frac{m_{f,cycle}}{2 \cdot n_{cil} \cdot (\theta_f - \theta_i)} \left(\text{sen} \left(\pi \cdot \frac{\theta - \theta_i}{\theta_f - \theta_i} \right) \right) \quad (3.2)$$

sendo

- θ ângulo de manivela, expresso em graus a partir do ponto morto superior;
- θ_i ângulo de início da injeção;
- θ_f ângulo de término da injeção;
- $m_{f,inj}$ massa de combustível injetada na mistura de gases que se encontra no volume de controle;
- $m_{f,cycle}$ massa de combustível injetada por ciclo pelo dispositivo de injeção;
- n_{cil} número de cilindros do motor.

A transferência instantânea de calor às paredes do cilindro poderá ser computada, pelos programas desenvolvidos neste trabalho, através das correlações de Annand [34] ou Woschni [35]. Os parâmetros de ajuste destas correlações foram escolhidos de acordo com as recomendações de seus autores. Durante a utilização dos modelos preditivo e de liberação de energia, no presente trabalho, empregou-se a correlação de Annand [34].

Como a determinação da taxa aparente de liberação de energia se dará entre o instante do fechamento da válvula, ou válvulas, de admissão e a abertura da válvula, ou válvulas, de escape, o único fluxo de massa presente nas fronteiras do sistema formado no interior do cilindro será o da injeção de combustível.

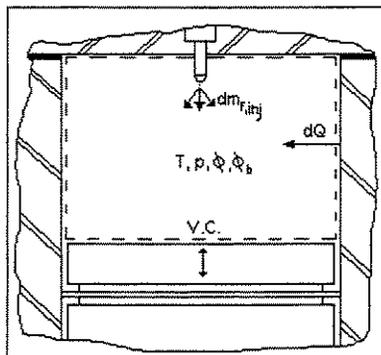


Figura 3.1: O volume de controle no cilindro.

Devido à hipótese de que todo o combustível que adentra o volume de controle estará vaporizado, e contido em um jato gasoso, pode-se esperar que a massa de combustível presente no fluido de trabalho venha a se comportar como um gás ideal. Assim, poderá se definir uma relação de equivalência combustível ar relativa a massa total de combustível, e outra concernente apenas a parcela queimada do combustível, representadas por ϕ e ϕ_b .

Desta forma, as propriedades do fluido de trabalho serão determinadas apenas em função da temperatura da mistura $T(\theta)$, da pressão média no interior do cilindro $p(\theta)$ e das taxas de equivalência correspondentes a parcela queimada do combustível $\phi_b(\theta)$, e a massa total de combustível $\phi(\theta)$.

A relação de equivalência ϕ , sob as hipóteses mencionadas na página anterior, pode ser expressa por:

$$\phi = \frac{m_f}{m_a \cdot f_{st}} \quad (3.3)$$

A relação de equivalência ϕ_b , sob estas hipóteses, pode ser expressa por:

$$\phi_b = \frac{m_{f,b}}{m_a \cdot f_{st}} \quad (3.4)$$

sendo

$m_{f,b}$	massa de combustível queimado que se encontra no volume de controle;
f_{st}	relação mássica combustível-ar estequiométrica;
m_a	massa de ar na mistura de gases que se encontra no volume de controle;
m_f	massa de combustível no volume de controle.

Através de um balanço de massa no sistema em estudo, desconsiderando-se vazamentos através dos anéis do pistão e escoamentos em folgas, tem-se:

$$\frac{dm}{d\theta} = \frac{d}{d\theta}(m_f + m_a) = \frac{dm_f}{d\theta} = \frac{d}{d\theta}(m_{f,inj})$$

$$\frac{dm_a}{d\theta} = 0$$

sendo m a massa da mistura de gases ideais que se encontra no volume de controle.

As expressões (3.3) e (3.4) podem ser facilmente colocadas na forma diferencial, resultando em:

$$\frac{d\phi}{d\theta} = \frac{1}{m_a \cdot f_{st}} \cdot \frac{d}{d\theta}(m_{f,inj}) \quad (3.5)$$

$$\frac{d\phi_b}{d\theta} = \frac{1}{m_a \cdot f_{st}} \cdot \frac{d}{d\theta}(m_{f,b}) \quad (3.6)$$

sendo $dm_{f,b}/d\theta$ a taxa aparente de queima do combustível.

Assim, a aplicação da primeira lei da termodinâmica para o volume de controle mostrado na Figura 3.1, considerando-se o balanço de massa anterior, resulta em:

$$\frac{d}{d\theta}(m \cdot u(T, p, \phi, \phi_b)) = -p \cdot \frac{dV}{d\theta} + \frac{dq_w}{d\theta} + h_{f,l} \cdot \frac{d}{d\theta}(m_{f,inj}) \quad (3.7)$$

sendo

$dq_w / d\theta$	derivada do calor trocado na fronteira do VC em relação ao ângulo de manivela;
V	volume no interior do cilindro;
u	energia interna específica da mistura de gases presente no cilindro;
T	temperatura da mistura de gases;
p	pressão da mistura de gases;
$h_{f,l}$	entalpia associada ao combustível injetado, no estado líquido.

A esta altura, pode-se identificar a comentada influência do fluxo de entalpia associado ao combustível injetado. Este fluxo é tratado no termo da Equação 3.7 contendo a entalpia do combustível injetado. A inconveniente associação entre o fluxo de entalpia e a queima do combustível, obtida através da adoção da hipótese de queima instantânea do combustível, fará com que a expressão utilizada para a determinação da taxa aparente de queima carregue durante toda a simulação um termo pertinente a esta entalpia. A equação abaixo, extraída de um modelo utilizado em um trabalho anterior [36], conserva a hipótese de queima instantânea do combustível.

$$\left[u(T, p, \phi_b) - h_{f,u} + \frac{m}{m_a \cdot f_{st}} \cdot \frac{\partial u}{\partial \phi_b} \right] \cdot \frac{dm_{pb}}{d\theta} = \frac{dq_w}{d\theta} - p \cdot \frac{dV}{d\theta} - m \left[\frac{\partial u}{\partial p} \cdot \frac{dp}{d\theta} + \frac{\partial u}{\partial T} \cdot \frac{dT}{d\theta} \right]$$

Geralmente, o tempo em que ocorre a injeção de combustível representa cerca de um quinto do tempo total de simulação. No restante do tempo de simulação as variações de entalpia e energia interna associadas a injeção do combustível causarão apenas instabilidades durante os cálculos, pois a variação da massa de combustível queimada no sistema jamais representará fisicamente um fluxo de massa em suas fronteiras, sendo na verdade uma mudança considerável em sua composição. Desta forma, a associação de um fluxo aparente de entalpia e energia interna

durante instantes nos quais não há injeção de combustível viola, simultaneamente, a aplicação de um balanço de massa e da primeira lei da termodinâmica no sistema real em estudo.

Desmembrando-se a derivada total da energia interna da mistura, presente na Equação 3.7, teremos duas parcelas, conforme indicado abaixo:

$$\frac{d}{d\theta}(m \cdot u(T, p, \phi, \phi_b)) = m \cdot \frac{du}{d\theta}(T, p, \phi, \phi_b) + u \cdot \frac{d}{d\theta}(m)$$

A primeira parcela representa a influência da variação da energia interna específica do sistema nesta derivada, podendo ser diretamente relacionada à taxa aparente de queima do combustível através da Equação 3.8. Já a segunda parcela demonstra a influência da variação da massa do sistema, não podendo de forma alguma ser relacionada à taxa de queima, e sim à taxa de injeção de combustível, conforme constatado no balanço de massa. A este termo também cabem os comentários efetuados a respeito da violação do balanço de massa e da primeira lei da termodinâmica. Pode-se acompanhar, durante o Capítulo 2 do presente documento, uma análise da influência do termo de variação da energia interna do sistema, juntamente com o fluxo de entalpia em suas fronteiras, sob as morfologias dos diagramas de liberação de energia e de temperatura média da carga no cilindro.

A variação da energia interna específica da mistura em relação ao ângulo de manivela pode ser expressa, através de sua diferencial total, por:

$$\frac{d}{d\theta}(u(T, p, \phi, \phi_b)) = \frac{\partial u}{\partial p} \cdot \frac{dp}{d\theta} + \frac{\partial u}{\partial T} \cdot \frac{dT}{d\theta} + \frac{\partial u}{\partial \phi} \cdot \frac{d\phi}{d\theta} + \frac{\partial u}{\partial \phi_b} \cdot \frac{d\phi_b}{d\theta}$$

Substituindo-se as variações das taxas de equivalência dadas pelas Equações (3.3) e (3.4) na expressão acima:

$$\frac{d}{d\theta}(u(T, p, \phi, \phi_b)) = \frac{\partial u}{\partial p} \cdot \frac{dp}{d\theta} + \frac{\partial u}{\partial T} \cdot \frac{dT}{d\theta} + \frac{1}{m_a \cdot f_{st}} \cdot \frac{\partial u}{\partial \phi} \cdot \frac{dm_{f, inj}}{d\theta} + \frac{1}{m_a \cdot f_{st}} \cdot \frac{\partial u}{\partial \phi_b} \cdot \frac{dm_{f, b}}{d\theta} \quad (3.8)$$

Acrescentando-se a Equação 3.8 e a derivada da massa no cilindro com relação ao ângulo de manivela, dada pelo balanço de massa no sistema, a Equação 3.7 tem-se:

$$\left[m \cdot \frac{\partial u}{\partial T} \right] \cdot \frac{dT}{d\theta} = -p \cdot \frac{dV}{d\theta} - \left[m \cdot \frac{\partial u}{\partial p} \right] \cdot \frac{dp}{d\theta} + \frac{dq_w}{d\theta} + \left[h_{f,i} - u - \frac{m}{m_a \cdot f_{st}} \cdot \frac{\partial u}{\partial \phi} \right] \cdot \frac{dm_{f,inj}}{d\theta} + \left[-\frac{m}{m_a \cdot f_{st}} \cdot \frac{\partial u}{\partial \phi_b} \right] \cdot \frac{dm_{f,b}}{d\theta} \quad (3.9)$$

A expressão acima será de grande valia na construção dos modelos matemáticos para simulação de motores diesel, utilizados neste trabalho. Além da primeira lei da termodinâmica, a equação de estado dos gases ideais, em sua forma diferencial, também será utilizada na obtenção de uma expressão de relevância na construção destes modelos.

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\theta}(p \cdot V) &= \frac{d}{d\theta}(m \cdot R(t, p, \phi, \phi_b) \cdot T) \\ \frac{1}{V} \cdot \frac{dV}{d\theta} + \frac{1}{p} \cdot \frac{dp}{d\theta} &= \frac{1}{T} \cdot \frac{dT}{d\theta} + \frac{1}{R} \cdot \frac{dR}{d\theta} + \frac{1}{m} \cdot \frac{dm}{d\theta} \end{aligned} \quad (3.10)$$

A variação da constante dos gases ideais para a mistura em relação ao ângulo de manivela pode ser expressa, através de sua diferencial total, por:

$$\frac{d}{d\theta}(R(T, p, \phi, \phi_b)) = \frac{\partial R}{\partial p} \cdot \frac{dp}{d\theta} + \frac{\partial R}{\partial T} \cdot \frac{dT}{d\theta} + \frac{\partial R}{\partial \phi} \cdot \frac{d\phi}{d\theta} + \frac{\partial R}{\partial \phi_b} \cdot \frac{d\phi_b}{d\theta}$$

Substituindo-se a expressão acima na Equação 3.10 tem-se:

$$\left(\frac{1}{R} \cdot \frac{\partial R}{\partial T} + \frac{1}{T} \right) \cdot \frac{dT}{d\theta} = \frac{1}{V} \cdot \frac{dV}{d\theta} + \left(\frac{1}{p} - \frac{1}{R} \cdot \frac{\partial R}{\partial p} \right) \cdot \frac{dp}{d\theta} - \left[\frac{\partial R}{\partial \phi_b} \left(\frac{1}{R \cdot m_a \cdot f_{st}} \right) \right] \cdot \frac{dm_{f,b}}{d\theta} - \left[\frac{\partial R}{\partial \phi} \left(\frac{1}{R \cdot m_a \cdot f_{st}} \right) + \frac{1}{m} \right] \cdot \frac{dm_{f,inj}}{d\theta} \quad (3.11)$$

A derivada da temperatura em relação ao ângulo de manivela pode ser eliminada da Equação 3.9 através de sua divisão pela expressão acima, resultando:

$$\begin{aligned} \left[-A \left(\frac{m}{m_a \cdot f_{st}} \cdot \frac{\partial u}{\partial \phi_b} \right) + \frac{\partial R}{\partial \phi_b} \left(\frac{1}{R \cdot m_a \cdot f_{st}} \right) \right] \cdot \frac{dm_{f,b}}{d\theta} &= \left[A \cdot p + \frac{1}{V} \right] \cdot \frac{dV}{d\theta} - A \cdot \frac{dq_w}{d\theta} + \left[\frac{1}{p} - \frac{1}{R} \cdot \frac{\partial R}{\partial p} + A \cdot m \cdot \frac{\partial u}{\partial \phi} \right] \cdot \frac{dp}{d\theta} - \left[\frac{\partial R}{\partial \phi} \left(\frac{1}{R \cdot m_a \cdot f_{st}} \right) + \frac{1}{m} + A \cdot \left(h_{f,i} - u - \frac{m}{m_a \cdot f_{st}} \cdot \frac{\partial u}{\partial \phi} \right) \right] \cdot \frac{dm_{f,inj}}{d\theta} \\ A &= \frac{\frac{1}{R} \cdot \frac{\partial R}{\partial T} + \frac{1}{T}}{m \cdot \frac{\partial u}{\partial T}} \end{aligned} \quad (3.12)$$

Durante a determinação da taxa aparente de queima, as equações diferenciais de primeira ordem (3.12) e (3.11) são integradas em relação ao ângulo de manivela, nesta mesma seqüência. Desta forma obtém-se a massa de combustível queimado pela integração da taxa aparente de queima, obtida a partir da Equação 3.10. Calcula-se a temperatura da mistura de gases no cilindro integrando-se a sua taxa de variação com relação ao ângulo de manivela, obtida a partir da Equação 3.11. Empregou-se para estas tarefas um algoritmo do tipo Runge-Kutta de quarta ordem [37].

A massa da mistura presente no sistema é computada através da soma de seu valor inicial, presente no instante em que a válvula de admissão se fecha, com a massa de combustível injetada. As relações de equivalência ϕ e ϕ_b são calculadas durante a simulação através das Equações (3.3) e (3.4).

A taxa de injeção de combustível foi modelada por uma função senoidal, com os ângulos de início e fim da injeção correspondendo a 0 e 180°.

A variação da concentração de óxido de nitrogênio no fluido de trabalho será obtida a partir de um esquema de cinética química reduzida. Assim, a concentração desta espécie química também será determinada pela aplicação do algoritmo de integração.

Obviamente os valores para a pressão média no cilindro e sua derivada, presentes nas equações enunciadas acima, são obtidos através do tratamento adequado dos dados experimentais para a pressão no interior do cilindro. Este tratamento será alvo de uma discussão detalhada no capítulo 5 do presente trabalho.

O volume instantâneo do cilindro, também presente nas equações deduzidas acima, será calculado a partir das relações geométricas do motor. As propriedades termodinâmicas do fluido de trabalho e suas derivadas em relação a temperatura, pressão e relação de equivalência serão determinadas durante os cálculos, por uma sub-rotina computacional. Esta sub-rotina considera a hipótese de que a carga do cilindro seja uma mistura homogênea de gases ideais, e também será discutida adiante.

A taxa aparente de liberação de energia, principal objetivo da aplicação deste modelo, será dada pela multiplicação da taxa aparente de queima de combustível pelo conteúdo energético deste combustível. Dividindo-se a taxa aparente de queima de combustível, pela massa total injetada, pode-se obter uma curva normalizada para a liberação de energia.

3.2 Obtenção de um modelo preditivo

Aproveitando-se as hipóteses utilizadas no modelo de liberação de energia pode-se construir um modelo preditivo, destinado a simulação do motor apenas do trecho em que as válvulas permanecem fechadas durante o ciclo, invertendo-se a situação de que a pressão média seja dada e a taxa de queima uma incógnita.

Assim, através da utilização das Equações (3.11) e (3.13), pode-se construir um modelo matemático capaz de fornecer a pressão média no interior do cilindro, em função da curva de liberação de energia. A Equação 3.13, apresentada abaixo, advém da manipulação matemática da Equação 3.12, isolando-se o termo da derivada de pressão.

$$-\left[\frac{1}{p} \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial p} + A \cdot m \frac{\partial u}{\partial p}\right] \frac{dp}{d\theta} = \left[A \cdot p + \frac{1}{V}\right] \frac{dV}{d\theta} - A \frac{dq_u}{d\theta} - \left[-A \cdot \left(\frac{m}{m_s \cdot f_u} \frac{\partial u}{\partial \phi_s}\right) + \frac{\partial R}{\partial \phi} \left(\frac{1}{R \cdot m_s \cdot f_u}\right)\right] \frac{dm_{y,b}}{d\theta} - \left[\frac{\partial R}{\partial \phi} \left(\frac{1}{R \cdot m_s \cdot f_u}\right) + \frac{1}{m} + A \cdot \left(h_{f,i} - u - \frac{m}{m_s \cdot f_u} \frac{\partial u}{\partial \phi}\right)\right] \frac{dm_{y,m}}{d\theta} \quad (3.13)$$

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

Durante a determinação da pressão média no cilindro, as equações diferenciais de primeira ordem (3.13) e (3.11) são integradas em relação ao ângulo de manivela, nesta mesma seqüência. A pressão média no interior do cilindro, obtida pela integração da Equação 3.13, e a temperatura média, computada através da integração da Equação (3.11), serão fortemente influenciadas pela taxa de queima do combustível, que neste modelo será fornecida pelo usuário. Para estas integrações também se utiliza um algoritmo do tipo Runge-Kutta de quarta ordem [37].

A massa da mistura presente no sistema é computada através da soma de seu valor inicial, presente no instante em que a válvula de admissão se fecha, com a massa de combustível injetada, fornecida a cada instante pelo usuário. As relações de equivalência ϕ e ϕ_b são calculadas durante a simulação através das Equações (3.3) e (3.4).

Para a taxa de injeção de combustível manteve-se o comportamento senoidal apresentado no modelo de liberação de energia. A variação da concentração de óxido de nitrogênio no fluido de trabalho também será obtida a partir de um esquema de cinética química reduzida, porém, de maneira divergente do modelo de liberação de energia, o estado termodinâmico do fluido de trabalho poderá não satisfazer a dados mensurados em um motor real. Espera-se que isto influencie, de forma negativa, a veracidade dos dados fornecidos para a concentração de óxido de nitrogênio no cilindro.

O volume instantâneo do cilindro, bem como as propriedades termodinâmicas do fluido de trabalho e suas derivadas em relação à temperatura, pressão e relação de equivalência serão determinadas por sub-rotinas computacionais idênticas às utilizadas no modelo de liberação de energia.

Alimentando-se o modelo preditivo, descrito há pouco, com dados suaves de liberação de energia, que possuam embasamento experimental, podem-se obter diagramas de pressão consideravelmente realísticos, conforme indica a Figura 3.2. Os dados de liberação de energia utilizados nesta simulação foram obtidos a partir da aproximação de diagramas fornecidos pela aplicação do modelo de liberação de energia por funções de Wiebe, para o regime de operação de 2600 rotações e 60% de carga.

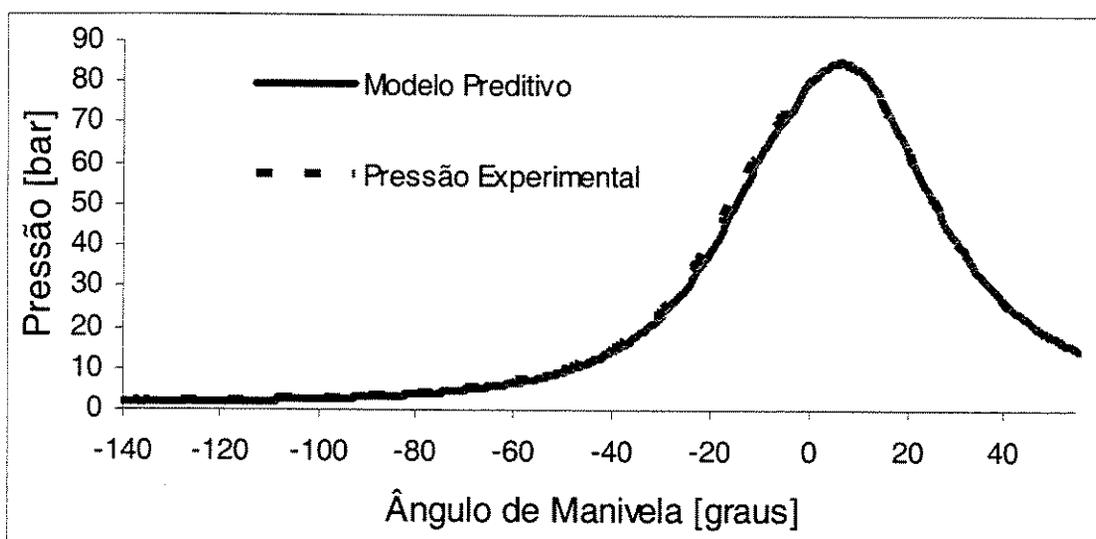


Figura 3.2: Resultados para a simulação preditiva do motor MWM Sprinter .

Capítulo 4

Propriedades Termodinâmicas do Fluido de Trabalho

Os modelos termodinâmicos de simulação dos processos ocorrentes em motores de ciclo diesel baseiam-se em expressões derivadas da primeira lei da termodinâmica, além de correlações teóricas e experimentais para a representação de fenômenos como a penetração do jato de combustível, sua vaporização e outros [14]. Nestas simulações, a primeira lei da termodinâmica pode ser aplicada globalmente a todo o sistema contido no cilindro do motor, sendo esta a abordagem adotada nos modelos de uma zona de combustão. Caso deseje-se levar em conta fenômenos como a distribuição do combustível injetado, e da temperatura, pode-se dividir o sistema formado pela carga do cilindro em zonas, nas quais também se aplicará a primeira lei da termodinâmica. Esta divisão do sistema estudado, em diversas zonas, origina os modelos chamados multizonais.

Assim sendo, durante a utilização de modelos termodinâmicos, qualquer abordagem quanto à divisão do sistema em estudo implicará a aplicação da primeira lei da termodinâmica, a uma ou diversas de suas zonas. Para que isto se efetive, faz-se necessário o conhecimento preciso das propriedades termodinâmicas do fluido de trabalho, além de suas derivadas com relação a variáveis como a temperatura, pressão e relação mássica entre combustível e ar. Visando-se determinar estas propriedades, é imprescindível a ciência da composição do fluido de trabalho ao longo de todo o tempo de simulação.

Nos modelos chamados multidimensionais, resolvem-se numericamente as equações médias no tempo de conservação de massa, momentum, energia e espécies químicas, de forma discretizada. Portanto, nestes modelos, a composição do fluido de trabalho irá variar espacialmente e temporalmente, fazendo-se novamente necessário o conhecimento das propriedades termodinâmicas do fluido de trabalho, para a correta solução das equações de conservação mencionadas acima.

Através destes breves comentários, a respeito das abordagens de cálculo efetuadas pelos principais modelos matemáticos para motores de combustão interna, pode-se ter noção da importância da correta avaliação da composição do fluido de trabalho, de maneira independente do modelo que se pretenda utilizar. Sob esta ótica, serão descritos os principais processos físico-químicos aos quais o fluido de trabalho é submetido, além do tratamento dado a estes processos pelos diversos modelos de simulação.

4.1 Processos ocorrentes no fluido de trabalho e seu tratamento durante a averiguação das propriedades termodinâmicas

O combustível injetado na câmara de combustão irá sofrer os processos de atomização, vaporização, difusão e oxidação. Conforme apresentado no capítulo 2, os fenômenos físico-químicos associados a estes processos, em motores de ignição por compressão, podem ser divididos esquematicamente em três mecanismos principais, ou fases, que ocorrem de maneira concorrente. Estes mecanismos serão revistos, adotando-se agora o enfoque à sua influência na composição e propriedades do fluido de trabalho, além da descrição das abordagens disponíveis para seu tratamento teórico.

4.1.1 Retardo da ignição

A fase de atraso da ignição inicia-se com a injeção de combustível, terminando com sua ignição. Esta fase é dominada pela cinética química de pré-ignição. Com o intuito de modelar o fenômeno de ignição, foram desenvolvidos esquemas de cinética reduzida para a oxidação de hidrocarbonetos a baixas temperaturas, como o modelo Shell [38], e subsequentemente os modelos de Cox e Cole [39] e Hu e Keck [19].

Estes modelos englobam várias reações elementares, e possuem considerável complexidade. A adoção do modelo Shell, por exemplo, exige a solução de quatro equações diferenciais, que representam a reação de oxidação do combustível. Outro inconveniente é que estas equações aumentam consideravelmente o esforço computacional em simulações numéricas de escoamentos reativos, pois exigem passos temporais consideravelmente menores que os demandados pela solução exclusiva do escoamento em motores [40].

Uma forma de se contornar este problema é a adoção de modelos empíricos para o retardo de ignição, radicalmente mais simples que os derivados da cinética reduzida, como o proposto por Hase e Hardenberg [41].

4.1.2 Combustão pré-misturada

Este mecanismo de combustão é caracterizado pela rápida propagação da chama através da mistura preparada previamente, durante a fase de atraso da ignição. Nesta etapa, portanto, a velocidade global da reação de combustão é limitada apenas por sua cinética química.

Costumeiramente, utiliza-se em seu modelamento um esquema de cinética global de um ou dois passos [42], cuja formulação para a velocidade de reação é do tipo exponencial (Arrhenius) [43, 44, 45, 46]. Portanto, a taxa com a qual o combustível será consumido neste mecanismo é abordada como função apenas da cinética química da reação de combustão, desconsiderando-se os efeitos da mistura dos reagentes.

Neste capítulo será ilustrada a aplicação de um modelo de cinética química global de um passo, durante a determinação da composição química do fluido de trabalho em um exemplo de combustão pré-misturada.

4.1.3 Combustão difusiva

Nos modernos motores diesel turbo-alimentados, o alto grau de turbulência presente na câmara de combustão é o principal responsável pela obtenção de grandes taxas de energia liberada, através de combustão, por unidade de volume, possibilitando assim a construção de motores mais compactos.

A influência da turbulência na câmara de combustão irá prevalecer, expressivamente, no mecanismo difusivo de queima. Uma vez esgotada a mistura previamente preparada em uma dada região do cilindro, inicia-se a fase difusiva da combustão. Nesta fase, a velocidade global da combustão será ditada pela mistura dos reagentes, visto que sua escala de tempo é consideravelmente superior a da cinética química de oxidação do combustível. Portanto, a combinação turbulenta dos reagentes irá crescer consideravelmente a velocidade global de consumo deste combustível, explicando assim as altas taxas de liberação de energia por unidade de volume, mencionadas acima.

A velocidade da reação global de combustão difusiva pode ser estimada através do modelo matemático de Magnusseem e Hjertager [47] baseado na combinação turbulenta dos reagentes, ou pela abordagem semi-empírica de tempo característico idealizada por Bracco e Reitz em 1985, e revisada posteriormente por Kong & Reitz [49]. Esta abordagem adequa-se também à fase pré-misturada da combustão, e pode ser considerada de grande utilidade, até que modelos com maior embasamento teórico sejam desenvolvidos [48].

4.2 Tratamento do fluido de trabalho em modelos multidimensionais

Dispondo-se de uma avaliação mais detalhada para o escoamento no interior do cilindro de motores de combustão interna, como a fornecida através de mecânica dos fluidos computacional, torna-se interessante a investigação de fenômenos como a ignição em uma câmara de combustão, ou a dispersão espacial de poluentes ao longo do fluido de trabalho. Para tanto, faz-se necessária a adoção de modelos para os fenômenos físico-químicos descritos acima, os quais, juntamente com a mecânica dos fluidos computacional, constituirão os softwares para a simulação de escoamentos reativos utilizados pelos modelos multidimensionais.

O código numérico de acrônimo SPEED [50] utiliza o modelo Shell [38] de oxidação de hidrocarbonetos em baixas temperaturas para simular a ignição da mistura combustível, acoplado a abordagem de Magnusseem e Hjertager [47], empregada no tratamento da mistura combustível a altas temperaturas.

Diversas metodologias para o tratamento da cinética química da combustão foram empregadas em conjunto com o software para simulação de escoamentos reativos KIVA [43, 44,45]. Em sua versão original o software utiliza, durante todo o processo de simulação, apenas um modelo de cinética química [14, 43, 44, 46]. Este modelo compreende o conjunto de reações químicas formado pela oxidação do combustível C_nH_m , representada por um esquema de cinética global de um passo, e pelas seis reações do mecanismo estendido de Zel'dowich. Embora esta abordagem possua relativa simplicidade, ela não é capaz de detectar características marcantes da combustão em motores de ignição por compressão, pois a velocidade da reação de combustão é considerada função apenas da temperatura. Entre os fenômenos excluídos por esta metodologia encontram-se o retardo na ignição da mistura combustível, e a importante influência da mistura turbulenta na taxa com que as reações químicas ocorrem. Desta forma, a abordagem através de cinética global, mencionada acima, aplica-se adequadamente apenas a simulação de chamas laminares.

Para contornar este inconveniente, Kong e Reitz [49] utilizaram uma combinação da aplicação do modelo Shell, para volumes de controle com temperatura abaixo de 1000 K, com a aplicação da abordagem semi-empírica de tempo característico, para temperaturas acima de 1000 K, modificando consideravelmente o tratamento dado pelo software KIVA II à cinética química da combustão. Os diagramas de pressão experimentais e preditos por esta abordagem demonstraram excelente concordância, validando a metodologia proposta por Kong e Reitz.

Outro modelo de combustão adaptado ao código numérico KIVA II foi proposto por Mariani e Postrioti [46]. Este modelo mantém a cinética global de um passo para a reação de oxidação do combustível, porém a taxa de ocorrência desta reação é computada de acordo com o mecanismo da combustão a cada instante. A ignição é modelada através do modelo empírico de Hase e Hardenberg [41]. A taxa de ocorrência da reação de combustão durante a fase pré-misturada é modelada por um comportamento exponencial (Arrhenius). Durante a fase difusiva, utiliza-se o modelo de Magnussem e Hjertager [47]. O critério utilizado para prever a transição do modelo de combustão pré-misturada, para o modelo de combustão difusiva, foi a correlação experimental de Watson e co-autores [22].

Conforme mencionado, os resultados oferecidos pelos modelos multidimensionais de simulação podem ser atrativos no estudo dos mecanismos de formação de poluentes, e na compreensão dos fenômenos físico-químicos ocorrentes no fluido de trabalho. O tratamento de forma discretizada do fluido de trabalho, através do método dos volumes de controle, possibilita a análise da distribuição espacial da concentração dos produtos da combustão, e sua evolução ao longo do tempo.

Pode-se assim abordar de forma diferenciada diversas partes deste domínio, de acordo com a fase da combustão detectada em cada volume de controle. Para que se possa ter uma idéia de quão poderosa é esta ferramenta, a localização dos primeiros focos de ignição obtida pela utilização da versão UW do software KIVA coincide com a determinada através de fotografias [48]. As curvas de pressão preditas através de modelos multidimensionais também confirmam a capacidade desta ferramenta, devido a sua concordância com valores experimentais [48].

4.3 Tratamento do fluido de trabalho em modelos termodinâmicos

Os modelos termodinâmicos multizonais computam a distribuição espacial e temporal da temperatura, e da composição do fluido de trabalho, através da divisão do combustível injetado em diversas parcelas, denominadas zonas. Considera-se a temperatura, a relação mássica entre combustível e ar, a pressão e a concentração dos produtos de combustão uniformes em cada zona. A localização de cada zona é determinada por correlações, baseadas em dados experimentais para jatos de combustível em regime permanente [14]. A taxa de ocorrência da combustão, assim como o de evaporação do combustível e formação de gotículas, a dinâmica do spray formado pela injeção deste combustível, e a transferência instantânea de calor pelas paredes, serão tratados através de fórmulas empíricas ou semi-empíricas.

Nesta abordagem, comumente, o fluido de trabalho em cada zona é considerado uma mistura homogênea de ar, produtos de combustão e vapores de combustível [51, 52, 53, 54]. O emprego de modelos de combustão e ignição determinará a proporção das parcelas queimada e não queimada do combustível em cada zona, através da integração da taxa de ocorrência da reação de combustão, dada por correlações semi-empíricas, em cada instante de simulação.

Através da consideração de que as reações químicas envolvendo os produtos da oxidação do combustível sejam consideravelmente mais rápidas que a cinética de formação dos óxidos de nitrogênio, os modelos multizonais costumam empregar, durante a averiguação da composição em cada zona, um conjunto de reações em equilíbrio químico para a maioria dos produtos de combustão. Comumente, associa-se a este conjunto de reações em equilíbrio o modelo de cinética reduzida de Zel'dovich, para a formação de óxidos de nitrogênio [32, 51, 52, 53, 54].

A medida que os modelos termodinâmicos eram desenvolvidos, publicaram-se diversos estudos aplicando a teoria de equilíbrio químico para os produtos da combustão, durante a determinação das propriedades do fluido de trabalho [55, 56, 57, 58]. Estes estudos acabaram sendo utilizados em modelos de uma zona de combustão, bem como em programas multizonais [13, 26, 31, 51, 52, 53, 54, 59]. Nestas publicações, as propriedades termodinâmicas do fluido de trabalho são averiguadas em função de sua temperatura, pressão e relação mássica entre combustível queimado e ar, presentes na zona de interesse.

Durante a oxidação de um hidrocarboneto, a velocidade com que algumas das reações químicas entre os produtos de combustão ocorrem é muito inferior a necessária para que a hipótese de equilíbrio químico mencionada acima se justifique. Em uma tentativa de suprir esta falha, esquemas voltados para a combustão em motores baseados na cinética química dos produtos de combustão, e relativamente completos, foram publicados inicialmente por Newhal [60], além de Spadaccini e Chinitz [61].

Todavia estes esquemas exigiam passos temporais demasiadamente pequenos, para evitar recorrentes instabilidades durante os cálculos [62]. Desta forma, a utilização desta abordagem por programas de simulação de motores de combustão interna tornava-se extremamente penosa, demandando excessivo esforço computacional.

Em uma tentativa de reduzir estes inconvenientes, Way [62] utilizou uma combinação de cinética química, para uma série de equações consideradas lentas, e equilíbrio parcial para as reações consideradas rápidas, envolvendo os produtos de combustão. Os resultados obtidos por esta abordagem demonstram que as concentrações do monóxido de carbono, bem como do óxido de nitrogênio, distanciam-se consideravelmente das previstas através da hipótese de equilíbrio químico.

Embora este tratamento ofereça claros benefícios frente a abordagem de equilíbrio químico, levando em conta a cinética de seis reações químicas consideradas “lentas”, fenômenos como a cinética química de pré-ignição, além da presença de combustível não queimado no fluido de trabalho, não são considerados diretamente. Sabe-se da importância da influência destes fenômenos sobre a concentração do monóxido de carbono formado, ficando assim extremamente comprometida a análise da concentração desta espécie química sob tal abordagem. Desta forma, justifica-se a relativa ausência de modelos baseados neste tipo de tratamento, no que se refere a simulação dos motores de ciclo diesel.

Já o óxido de nitrogênio sofre menor influência destes fatores, tornando-se assim rentável a introdução de reações regidas pela cinética química para representar as variações de concentração desta espécie química, associadas a reações de equilíbrio químico para os demais constituintes dos produtos de combustão. Prova disto é o sucesso na aplicação da cinética reduzida de Zel'dowich por diversos modelos multizonais [32, 51, 52, 53, 54], e multidimensionais [43, 44, 45], com o intuito de se prever as concentrações de óxido de nitrogênio nos gases de escape de motores diesel.

4.4 Um modelo baseado em equilíbrio parcial

O propósito do presente trabalho é a discussão do desenvolvimento e utilização de ferramentas de diagnóstico, baseadas em modelos termodinâmicos para motores de ciclo diesel. Por conseguinte, durante o tratamento do fluido de trabalho não se almeja a obtenção irrestrita das condições verificadas nos escoamentos reativos reais, e sim subsídios para a aplicação destas ferramentas.

Sob esta ótica, desenvolveu-se um esquema adequado à utilização apenas em modelos termodinâmicos, voltado à determinação da composição do fluido de trabalho em cada zona. Consideram-se como constituintes do fluido de trabalho o combustível não queimado, sob a hipótese de gás ideal, em conjunto com os produtos de combustão. Estes produtos são formados pela reação completa da parcela queimada do combustível com o ar presente na zona em questão. Desta maneira evitou-se o tratamento direto à taxa de ocorrência da reação de combustão, tendo-se a necessidade da explicitação da velocidade com a qual o combustível será queimado, conforme citado na descrição dos modelos termodinâmicos.

Assim sendo, sub-modelos para a taxa com a qual o combustível estará sendo oxidado na zona de interesse serão necessários para determinar as quantidades de combustível reagido e não reagido em cada zona. De acordo com a natureza do processo de combustão, em cada zona, pode-se utilizar um dado modelo de queima para o combustível.

Para a queima difusiva, por exemplo, pode-se utilizar um esquema baseado na dissipação turbulenta, ou tempo característico. Para a queima pré-misturada pode-se utilizar uma formulação do tipo de Arrhenius, conforme se fará no item 4.5.1 deste capítulo. A fase de atraso de ignição poderá ser tratada por um dos modelos de oxidação a baixas temperaturas, mencionados anteriormente.

Um caso relevante, no qual se fundamenta este trabalho, é o levantamento da taxa de queima do combustível através da aplicação da primeira lei da termodinâmica à zona de interesse. Neste tipo de simulação numérica, a taxa com a qual os reagentes serão consumidos é obtida a partir de dados experimentais para a pressão e volume no cilindro.

Com o intuito de se distinguir a parcela queimada da não oxidada do combustível presente em cada zona foram definidas, durante o capítulo 3, duas taxas de equivalência, que neste capítulo serão generalizadas para modelos de uma ou mais zonas de combustão.

A taxa de equivalência da parcela queimada (ϕ_b) será dada por:

$$\phi_b = \frac{\left(\frac{m_{f,b}}{m_a}\right)_{real}}{\left(\frac{m_{f,b}}{m_a}\right)_{st}} = \frac{\left(\frac{m_{f,b}}{m_a}\right)}{f_{st}} \quad (4.1)$$

A taxa de equivalência total (ϕ) será dada por:

$$\phi = \frac{\left(\frac{m_f}{m_a}\right)_{real}}{\left(\frac{m_{f,b}}{m_a}\right)_{st}} = \frac{\left(\frac{m_f}{m_a}\right)}{f_{st}} \quad (4.2)$$

sendo

- m_f massa total de combustível presente na zona;
- $m_{f,b}$ massa de combustível queimado presente na zona;
- m_a massa de ar presente na zona;
- f_{st} relação mássica combustível-ar estequiométrica.

Desta forma, a composição do fluido de trabalho em uma zona pode ser definida através de quatro variáveis: a sua temperatura (T), sua pressão (p) e suas taxas de equivalência ϕ e ϕ_b . Durante a utilização do esquema proposto em modelos multizonais, pode-se determinar a velocidade da reação de queima em cada zona através da variação de sua relação de equivalência. Para tanto, empregam-se expressões semi-empíricas como a idealizada por Giannattasio e Micheli [53], dada por:

$$\frac{d}{dt}(\phi_b) = K' \cdot \sqrt{T} \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T}} \cdot \frac{f_{st} \cdot m_a}{V \cdot M_f} \cdot (\phi - \phi_b) \cdot (z - \phi_b) \quad (4.3)$$

sendo

- K' constante de taxa de reação;
- E energia de ativação, considerada como parâmetro de ajuste do modelo [24];
- \bar{R} constante universal dos gases;
- V volume da zona;
- M_f massa molar do combustível;
- z parâmetro regido pela taxa de equivalência, ver [53].

4.4.1 Os produtos de combustão

Considerando-se uma mistura formada pelos produtos da combustão de um hidrocarboneto, deve-se mencionar que a concentração de alguns destes produtos de combustão, como o óxido de nitrogênio e o monóxido de carbono, é fortemente governada por reações químicas cuja taxa de ocorrência é relativamente baixa [60, 61, 62]. Portanto, o correto mapeamento da concentração destas substâncias demanda, a princípio, a inclusão de modelos baseados em cinética química durante o tratamento das reações entre os produtos de combustão. A preocupação com a correta avaliação da concentração das substâncias citadas acima se fundamenta no fato de que, juntamente com os óxidos de enxofre, particulados e hidrocarbonetos não queimados, elas constituem os principais poluentes emitidos por motores de ciclo diesel.

Objetivando-se a futura utilização dos algoritmos de cálculo propostos neste trabalho em modelos multizonais, além da obtenção de subsídios para o comportamento de substâncias poluentes, como as mencionadas no parágrafo acima, serão discutidas as principais espécies químicas que constituem os produtos da queima de um combustível contendo carbono, hidrogênio, oxigênio, nitrogênio e enxofre, e seu respectivo tratamento quanto a cinética química.

ARGÔNIO:

Por ser uma substância inerte, o argônio usualmente é computado juntamente com o nitrogênio presente no ar. Contudo durante a futura aplicação do esquema de cinética reduzida de Zel'dovich, com o intuito de se determinar a concentração de óxido de nitrogênio, a concentração de nitrogênio é um dos parâmetros de cálculo. Assim, o tratamento em conjunto do argônio e do nitrogênio fica impossibilitado, sendo o argônio adotado como produto de combustão.

MONÓXIDO DE CARBONO E METANO:

Usualmente, os níveis de concentração do monóxido de carbono encontram-se ligeiramente acima dos previstos via equilíbrio químico, para a maioria das situações presentes nas simulações de motores de combustão interna [60]. Este comportamento se deve a rápida formação do monóxido de carbono na região de chama, a partir da oxidação de hidrocarbonetos, associada a sua lenta destruição, através de oxidação e formação de dióxido de carbono.

Conforme se comentou, o monóxido de carbono é formado em chamas pela rápida oxidação de hidrocarbonetos na região de reação. Subseqüentemente ele é oxidado, de maneira lenta, por reações que quando combinadas formam a reação de equilíbrio água-gás (4.4) [63, 64].



Esta lenta conversão do monóxido de carbono em dióxido de carbono, nos gases da região pós chama, pode ser modelada por uma reação global, através da Equação 4.5, cuja formulação para a velocidade de reação é do tipo exponencial (Arrhenius) [65]. A aplicação desta expressão exige o conhecimento da localização das regiões onde o monóxido de carbono formado durante a combustão está se oxidando lentamente, sendo portanto impraticável em modelos de uma zona de combustão. Outro inconveniente para este tipo de formulação é a estreita região de temperaturas e pressões nas quais ele é válido, quase sempre excedida durante as simulações de motores de combustão interna. Desta maneira, valores adequados para o fator pré-exponencial e, ou, para a energia de ativação da expressão (4.5), deverão ser ajustados de modo a reproduzir concentrações de monóxido de carbono verificadas experimentalmente, para o motor que se deseje simular.

$$\frac{d}{dt}([CO]) = -4 \cdot 10^{14} \cdot [CO] \cdot [O_2]^{\frac{1}{4}} \cdot [H_2O]^{\frac{1}{2}} \cdot e^{\frac{-20.202.00}{T}} \left(\frac{mol}{cm^3 \cdot s} \right) \quad (4.5)$$

sendo

$[CO]$	concentração de CO (mol/cm ³);
$[O_2]$	concentração de O ₂ (mol/cm ³);
$[H_2O]$	concentração de H ₂ O (mol/cm ³).

Almejando-se estender a utilização da sub-rotina de determinação da composição do fluido de trabalho descrita neste documento a modelos multizonais, pode-se optar pelo tratamento do monóxido de carbono através de cinética química nas zonas que se encontrem na região de pós chama ($\phi_b \approx \phi$).

Nas regiões com presença de chama ($0 < \phi_b < \phi$), o monóxido de carbono pode ser considerado em equilíbrio químico. Devido às altas temperaturas presentes nestas zonas, e a alta velocidade com que ele é produzido, o monóxido de carbono é encontrado a concentrações muito próximas das de equilíbrio químico nestes locais, como pode ser confirmado na referência [62].

Mesmo aplicando-se a metodologia descrita acima, corre-se o risco de que as estimativas para a concentração de monóxido de carbono fornecidas por um modelo multizonal mostrem-se inadequadas. Isto ocorre devido a abordagem radicalmente superficial sugerida no parágrafo acima, tendo-se em vista a complexidade dos fenômenos envolvidos na combustão em motores diesel. Mesmo utilizando-se modelos multidimensionais, como o software KIVA, podem-se obter resultados inadequados para as emissões de monóxido de carbono [66].

Durante a aplicação de modelos com uma zona de combustão, a distinção entre as zonas com alta e baixa relação de equivalência torna-se impossível. Como o presente trabalho baseia-se em modelos de uma zona de combustão, a cinética química da oxidação do monóxido de carbono não será considerada.

Assumindo-se, portanto, que o monóxido de carbono estará em equilíbrio químico com os demais produtos da combustão, presume-se que a velocidade das reações nas quais ele é formado e oxidado seja muito alta. Assim, no intervalo de tempo entre duas determinações consecutivas da composição do fluido de trabalho, a concentração de monóxido de carbono passará, hipoteticamente, de seu valor inicial para um valor muito próximo do previsto pela sua combinação, em equilíbrio químico, com os demais constituintes da mistura em estudo. Desta forma, pode-se determinar a concentração do monóxido de carbono, e de outras substâncias para as quais se assumiu este comportamento, empregando-se uma formulação de equilíbrio químico parcial dos produtos de combustão [62].

A introdução do metano entre os produtos de combustão, além do benefício de acrescer mais uma substância poluente ao sistema, torna-se adequada por proporcionar a introdução de uma reação química de elevada velocidade no modelo, envolvendo o monóxido de carbono.

Nesta reação o monóxido de carbono irá combinar-se com o hidrogênio, formando água e metano.



DIÓXIDO DE CARBONO:

Outra substância química de grande relevância presente nos produtos de combustão é o dióxido de carbono. Juntamente com a água, o dióxido de carbono é um dos produtos de combustão com maior participação na composição do fluido de trabalho.

A presença de dióxido de carbono nos produtos gerados pela combustão completa de um hidrocarboneto se dá de forma diversa a do monóxido de carbono. As concentrações desta substância aproximam-se das apontadas pela adoção da hipótese de equilíbrio químico, mencionada anteriormente [61].

A reação química admitida para a formação do dióxido de carbono, dada pela Equação 4.7, possui cinética química de elevada velocidade [62], apesar de envolver o monóxido de carbono. Portanto pode-se modelá-la através da hipótese de equilíbrio químico.



ÁGUA

Conforme mencionado, a água é um importante constituinte do fluido de trabalho. Como no caso do dióxido de carbono, sua concentração entre os produtos de combustão aproxima-se das apontada pela hipótese de equilíbrio químico [61].

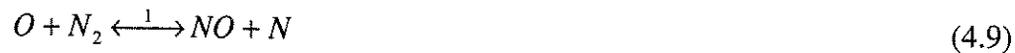
A reação química admitida para a formação da água em equilíbrio, indicada pela Equação 4.8, também possui velocidades de reação relativamente altas.



ÓXIDO DE NITROGÊNIO

Em condições experimentadas pelos motores de combustão interna, o tempo para que a concentração do óxido de nitrogênio atinja os níveis de equilíbrio químico com os demais produtos de combustão é muito elevado, quando comparado à escala de tempo com que o processo de queima ocorre nestes motores. Assim, a concentração real deste produto de combustão, no fluido de trabalho, pode alcançar até um décimo de seu valor sob a hipótese de equilíbrio químico [64]. Torna-se, portanto, inevitável seu tratamento através de um modelo que inclua cinética química para sua formação e destruição. As maiores fontes de óxido de nitrogênio durante a combustão são a oxidação do nitrogênio molecular na região já varrida pela chama (NO térmico), a sua formação na zona da chama, e finalmente a oxidação de compostos presentes no combustível que contenham nitrogênio [64].

Nas condições experimentadas em motores de ciclo diesel, o mecanismo térmico é o maior responsável pela formação de óxido de nitrogênio [48]. Seu esquema básico é muito bem representado pelas seis reações a seguir, através do mecanismo estendido de Zel'dowich [67]:



Embora o par de reações indicado pela Equação 4.11 tenha pouca relevância para condições de mistura pobre, sua manutenção no esquema justifica-se durante cálculos em condições de mistura rica. Nestas condições, a concentração de oxigênio passará a ser baixa, fazendo com que os pares de reações (4.9) e (4.10) tornem-se insuficientes para modelar o comportamento do óxido de nitrogênio. O mecanismo de Zel'dowich é governado pela Equação 4.9, cuja energia de ativação é muito alta, sendo portanto bastante lenta em baixas temperaturas. Como resultado disto, o óxido de nitrogênio térmico é formado durante as reações pós-chama, a elevadas temperaturas. A taxa na qual o óxido de nitrogênio térmico é formado é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}([NO]) = & k_{1+} \cdot [O] \cdot [N_2] + k_{1-} \cdot [NO] \cdot [N] + k_{2+} \cdot [N] \cdot [O_2] \\ & + k_{2-} \cdot [NO] \cdot [O] + k_{3+} \cdot [N] \cdot [OH] + k_{3-} \cdot [NO] \cdot [OH] \end{aligned} \quad (4.12)$$

sendo

$[NO]$	concentração de NO (mol/cm ³);
$[O]$	concentração de O em equilíbrio químico (mol/cm ³);
$[N]$	concentração inicial de N em equilíbrio químico (mol/cm ³);
$[N_2]$	concentração de N ₂ em equilíbrio químico (mol/cm ³);
$[O_2]$	concentração de O ₂ em equilíbrio químico (mol/cm ³);
$[OH]$	concentração de OH em equilíbrio químico (mol/cm ³).

As constantes de reação, com as unidades de (cm³ · mol⁻¹ · s⁻¹), são dadas por [67]:

$$\begin{aligned} k_{1+} &= 1,8 \cdot 10^{14} \cdot e^{-\frac{38.370,0}{T}} \\ k_{1-} &= 3,8 \cdot 10^{13} \cdot e^{-\frac{425,0}{T}} \\ k_{2+} &= 1,8 \cdot 10^{10} \cdot T \cdot e^{-\frac{4.680,0}{T}} \\ k_{2-} &= 3,8 \cdot 10^9 \cdot T \cdot e^{-\frac{20.820,0}{T}} \\ k_{3+} &= 7,1 \cdot 10^{13} \cdot e^{-\frac{450,0}{T}} \\ k_{3-} &= 1,7 \cdot 10^{14} \cdot e^{-\frac{24.560,0}{T}} \end{aligned}$$

O efeito da oxidação de compostos com nitrogênio pertencentes a combustíveis destilados, como o diesel, não é muito significativo. Isto ocorre porque a presença destes compostos é pequena nestes combustíveis. Resultados da oxidação de nitrogênio presente no combustível foram levantados por Monroe e co-autores [68], para a combustão em fornalhas a óleo.

Durante a determinação da concentração de óxido de nitrogênio, será considerado apenas seu mecanismo térmico de formação, tendo-se em vista a já citada predominância deste mecanismo nas condições verificadas em motores diesel [48]. Diferentemente do monóxido de carbono, cuja concentração será determinada por equilíbrio químico, o óxido de nitrogênio deverá receber tratamento diferenciado frente as demais espécies químicas. Sua concentração será obtida a partir da integração ao longo do tempo de sua taxa de variação, dada pela Equação 4.12.

ÓXIDOS DE ENXOFRE

Todos os produtos derivados de petróleo contêm componentes organo-sulfúricos, cuja origem e concentração dependem da procedência do óleo cru. Tipicamente, a concentração de enxofre presente nos combustíveis líquidos varia de 0,1%, para o querosene, até 3%, para óleos pesados, em fração mássica. Durante a queima, os componentes organo-sulfúricos presentes no combustível mostram-se termicamente instáveis. Desta forma as ligações S-S e S-C quebram-se rapidamente e, com a presença da atmosfera oxidante da zona de combustão, forma-se o dióxido de enxofre [69].

O trióxido de enxofre forma-se a partir da oxidação do dióxido de enxofre, sendo as reações envolvidas neste processo consideravelmente rápidas [70]. Durante a combustão, em condições medianas de temperatura e relação de equivalência, a concentração de trióxido de enxofre é tipicamente de 0,2 a 3% da concentração total dos óxidos de enxofre formados. Porém sua participação na composição da carga do cilindro torna-se extremamente importante em condições de baixa temperatura e mistura pobre.

O monóxido de enxofre, uma substância altamente instável, também foi incluída entre os produtos formados durante a combustão, apesar de sua presença quase irrelevante nestes produtos.

Conforme mencionado, as reações envolvendo os óxidos de enxofre ocorrem a altas velocidades no sistema em estudo, justificando-se assim a adoção da hipótese de equilíbrio químico para as reações mostradas a seguir.



HIDROXILA

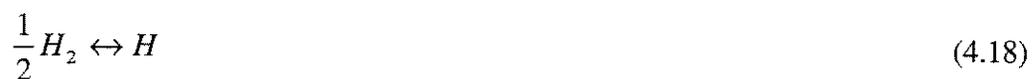
A hidroxila, apesar de possuir pequena presença na composição química do fluido de trabalho, é uma substância importante no mapeamento da formação de óxido de nitrogênio. Por esta razão esta substância foi incluída nos cálculos, sendo a sua concentração sob a hipótese de equilíbrio químico suficiente para a correta alimentação da cinética reduzida de Zel'dowich [67]. A reação química considerada para a formação da hidroxila em equilíbrio químico é indicada a seguir.



HIDROGÊNIO, OXIGÊNIO E NITROGÊNIO.

Os gases hidrogênio, nitrogênio e oxigênio também foram levados em conta, em seu estado de referência e monoatômico, durante a determinação da composição da carga do cilindro. Desta forma pôde-se prever os efeitos da dissociação destes gases, a partir de seu estado de referência. Este efeito torna-se apreciável a altas temperaturas, como as ocorrentes durante a combustão em motores.

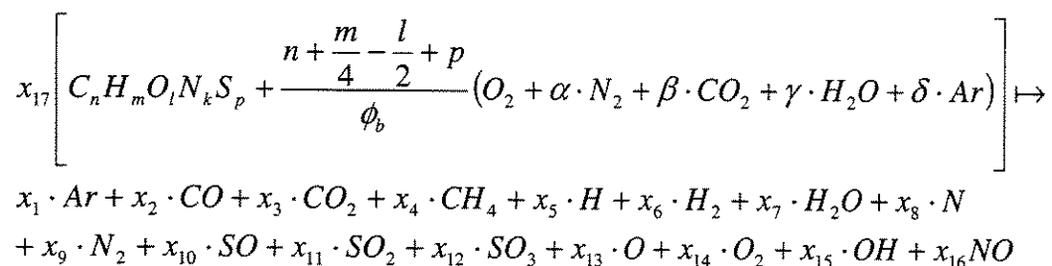
As reações 4.16, 4.17 e 4.18 representam, de forma direta, a dissociação destes gases para o esquema em estudo.



A abordagem resultante da análise descrita acima resultou em um sistema em equilíbrio parcial formado por dezesseis espécies químicas, sendo apenas o óxido de nitrogênio excluído da hipótese de equilíbrio químico, devido a forte influência da cinética química em seus mecanismos de formação e destruição.

4.4.2 A formulação de um sistema de equações

A combustão, em presença de ar formado pela combinação de argônio Ar, água H₂O, dióxido de carbono CO₂, nitrogênio N₂ e oxigênio O₂, de um hidrocarboneto contendo em sua estrutura molecular átomos de carbono C, hidrogênio H, oxigênio O, nitrogênio N e enxofre S pode ser representada através da seguinte equação:



sendo

n, m, l, k, p número de átomos de C, H, O, N e S, respectivamente, na fórmula (empírica) do combustível;

ϕ_b taxa de equivalência entre o combustível queimado e o ar, definida como a relação real combustível queimado-ar dividida pela estequiométrica;

x_1, \dots, x_{16} frações molares das espécies químicas constituintes dos produtos de combustão;

x_{17} número de mols de combustível queimado necessário para produzir um mol de produtos;

$\alpha, \beta, \gamma, \delta$ número de moles de N₂, CO₂, H₂O e Ar presentes no ar para cada mol de O₂.

A partir da equação de combustão podem-se obter diversas relações independentes, com o intuito de se formar um sistema de equações algébricas cuja solução forneça a composição dos produtos da combustão.

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

$$\sum_{i=1}^{16} x_i + x_{f,u} = 1 \quad (4.19)$$

$$x_{f,u} = \frac{T \cdot \bar{R} \cdot f_{st} \cdot m_a \cdot (\phi - \phi_b)}{M_f \cdot p \cdot V}$$

sendo $x_{f,u}$ a fração molar de combustível não queimado no fluido de trabalho.

A partir dos balanços de átomos dos elementos químicos C, H, O, N, S e Ar, respectivamente, obtém-se as seguintes relações:

$$x_2 + x_3 + x_4 - x_{17}(n + \beta \cdot r) = 0 \quad (4.20)$$

$$4 \cdot x_4 + x_5 + 2 \cdot x_6 + 2 \cdot x_7 + x_{15} - x_{17}(m + 2 \cdot \gamma \cdot r) = 0 \quad (4.21)$$

$$x_2 + 2 \cdot x_3 + x_7 + x_{10} + 2 \cdot x_{11} + 3 \cdot x_{12} + 2 \cdot x_{14} + x_{15} + x_{16} - x_{17}(l + (2 + 2 \cdot \beta + \gamma) \cdot r) = 0 \quad (4.22)$$

$$x_8 + 2 \cdot x_9 + x_{16} - x_{17}(k + 2 \cdot \alpha \cdot r) = 0 \quad (4.23)$$

$$x_{10} + x_{11} + x_{12} - x_{17} \cdot p = 0 \quad (4.24)$$

$$x_1 - x_{17} \cdot \delta \cdot r = 0 \quad (4.25)$$

sendo

$$r = \frac{\left(n + \frac{m}{4} - \frac{l}{2} + p \right)}{\phi_b}$$

Outras nove equações podem ser obtidas a partir das expressões para a lei de ação das massas [71], para gases ideais, que escritas para as reações (4.6, 4.7, 4.8, 4.13, 4.14, 4.15, 4.16, 4.17, 4.18) resultam, respectivamente, em:

$$K_{p,1} \cdot \left(\frac{P}{P_0}\right)^2 \cdot x_2 \cdot x_{14}^3 - x_6 \cdot x_7 = 0 \quad (4.26)$$

$$K_{p,2} \cdot x_2 \cdot x_{15} - x_3 \cdot x_5 = 0 \quad (4.27)$$

$$K_{p,3} \cdot \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot x_6 \cdot (x_{14})^{\frac{1}{2}} - x_7 = 0 \quad (4.28)$$

$$K_{p,4} \cdot \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot x_{10} \cdot (x_{14})^{\frac{1}{2}} - x_{11} = 0 \quad (4.29)$$

$$K_{p,5} \cdot \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot x_{11} \cdot (x_{14})^{\frac{1}{2}} - x_{12} = 0 \quad (4.30)$$

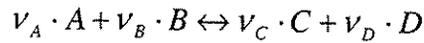
$$K_{p,6} \cdot (x_6)^{\frac{1}{2}} \cdot (x_{14})^{\frac{1}{2}} - x_{15} = 0 \quad (4.31)$$

$$K_{p,7} \cdot \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot (x_{14})^{\frac{1}{2}} - x_{13} = 0 \quad (4.32)$$

$$K_{p,8} \cdot \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot (x_9)^{\frac{1}{2}} - x_8 = 0 \quad (4.33)$$

$$K_{p,9} \cdot \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot (x_6)^{\frac{1}{2}} - x_5 = 0 \quad (4.34)$$

Nas equações anteriores, o termo $K_{p,i}$ representa a constante de equilíbrio químico da reação i correspondente. Para uma reação genérica do tipo



a constante de equilíbrio pode ser definida como:

$$\ln(K_p) = -\frac{\Delta G^0}{R \cdot T}$$

$$\Delta G^0 = \nu_C \cdot \bar{g}_C + \nu_D \cdot \bar{g}_D - \nu_A \cdot \bar{g}_A - \nu_B \cdot \bar{g}_B$$

sendo

ΔG^0 energia livre de Gibbs associada a reação;

g_i energia livre de Gibbs da substância i , em base molar.

As constantes de equilíbrio químico das reações (4.26-4.34) serão dadas por:

$$\ln(K_{p,1}) = \frac{\bar{g}_{CO} + 3 \cdot \bar{g}_{H_2} - \bar{g}_{CH_4} - \bar{g}_{H_2O}}{R \cdot T}$$

$$\ln(K_{p,2}) = \frac{\bar{g}_{CO} + \bar{g}_{OH} - \bar{g}_{CO_2} - \bar{g}_H}{R \cdot T}$$

$$\ln(K_{p,3}) = \frac{\bar{g}_{H_2} + \frac{1}{2} \cdot \bar{g}_{O_2} - \bar{g}_{H_2O}}{R \cdot T}$$

$$\ln(K_{p,4}) = \frac{\bar{g}_{SO} + \frac{1}{2} \cdot \bar{g}_{O_2} - \bar{g}_{SO_2}}{R \cdot T}$$

$$\ln(K_{p,5}) = \frac{\bar{g}_{SO_2} + \frac{1}{2} \cdot \bar{g}_{O_2} - \bar{g}_{SO_3}}{R \cdot T}$$

$$\ln(K_{p,6}) = \frac{\frac{1}{2} \cdot \bar{g}_{H_2} + \frac{1}{2} \cdot \bar{g}_{O_2} - \bar{g}_{OH}}{R \cdot T}$$

$$\ln(K_{p,7}) = \frac{\frac{1}{2} \cdot \bar{g}_{O_2} - \bar{g}_O}{R \cdot T}$$

$$\ln(K_{p,8}) = \frac{\frac{1}{2} \cdot \bar{g}_{N_2} - \bar{g}_N}{R \cdot T}$$

$$\ln(K_{p,9}) = \frac{\frac{1}{2} \cdot \bar{g}_{H_2} - \bar{g}_H}{R \cdot T}$$

Resta ainda uma relação para o óxido de nitrogênio, que será calculado a partir do mecanismo estendido de Zel'dowich [67], através da integração da Equação 4.12.

$$x_{16} = \frac{p \cdot [NO]}{1013250,0 \cdot R \cdot T} \quad (4.35)$$

sendo $[NO]$ a concentração de NO prevista por cinética reduzida (mol/cm^3)

A concentração de monóxido de carbono, nas zonas de pós chama, poderá ser computada por cinética reduzida através da integração da expressão (4.5). Neste caso, deve-se substituir a Equação 4.26 pela seguinte equação:

$$x_2 = \frac{p \cdot [CO]}{1013250,0 \cdot R \cdot T} \quad (4.36)$$

sendo $[CO]$ a concentração de CO prevista por cinética reduzida (mol/cm^3)

As equações (4.19) a (4.35) podem ser agrupadas, formando-se um sistema com 17 equações, muitas das quais não lineares, e 17 incógnitas.

4.4.3 A solução do sistema de equações para a composição do fluido de trabalho

Usualmente, durante a determinação da composição de misturas em equilíbrio, o sistema de equações a ser resolvido é trabalhado algebricamente, buscando-se a redução do número de equações [25, 55, 57, 59]. Tendo-se em conta a dualidade no tratamento do monóxido de carbono, a probabilidade de se modificar alguma das equações, ou adicionar-se alguma outra substância entre os produtos de combustão, optou-se pela manutenção do sistema de equações em sua forma original. Desta forma obteve-se um esquema mais flexível para futuras modificações; no entanto o elevado número de equações a ser resolvido demandou a utilização de um algoritmo sofisticado em sua solução.

Assim, para resolver o sistema não linear de equações que governa este problema utilizou-se o Método de Newton Raphson Globalmente Convergente [37]. Durante a determinação da matriz jacobiana do sistema em questão, tendo-se em mente a adaptabilidade do código gerado a modificações de substâncias e equações computadas, empregou-se um esquema de diferenças centrais [72]. A utilização de uma matriz jacobiana obtida analiticamente, apesar de conferir maior precisão e taxa de convergência ao método numérico, dificultaria substancialmente a implementação de modificações no equacionamento adotado.

A determinação da solução de sistemas de equações não lineares é uma tarefa difícil. No caso em questão a proximidade de valores nulos para algumas das frações molares a serem determinadas, a dificuldade na adoção de uma estimativa inicial adequada às diversas situações de cálculo, além da possibilidade de algumas equações tornarem-se triviais, dificultam ainda mais a obtenção de uma solução adequada. Para contornar estas dificuldades, diversas adaptações ao método de Newton-Raphson Globalmente Convergente foram introduzidas na rotina de cálculos empregada neste trabalho. Estas modificações, bem como a análise dos resultados obtidos com sua utilização, encontram-se listados detalhadamente na referência [56].

No transcorrer deste trabalho mencionou-se inúmeras vezes a hipótese de que os produtos da combustão se comportassem como gases ideais, além da utilização de algumas propriedades termodinâmicas específicas destes produtos. A obtenção destas propriedades e a adequação da hipótese de gás ideal para estes produtos serão comentadas no item a seguir

4.4.4 As propriedades termodinâmicas dos produtos de combustão

É imperativo que as propriedades termodinâmicas dos produtos de combustão sejam calculadas com adequada precisão, pois elas influenciam intensamente os resultados fornecidos pela rotina de determinação da composição em equilíbrio destes produtos. Esta influência deve-se a contribuição direta da energia livre de Gibbs dos diversos produtos durante o cálculo das constantes de equilíbrio químico, presentes em expressões baseadas na lei de ação das massas [71]. Juntamente com expressões resultantes do balanço de átomos para alguns elementos químicos, a lei de ação das massas ajudou a definir um sistema de equações cuja resolução fornecerá a composição do fluido de trabalho, conforme exposto anteriormente.

A hipótese de que os produtos de combustão constituam uma mistura de gases ideais pode ser justificada pelo trabalho de Zacharias [73], que empregou uma forma modificada da equação de estado de Beattie-Bridgeman para avaliar as propriedades dos produtos de combustão. Os resultados obtidos neste trabalho atestam que, para a faixa de temperaturas e pressões de interesse neste trabalho, o fator de compressibilidade é essencialmente unitário.

Sob esta ótica, ressaltando-se sua grande importância, será descrita a abordagem utilizada na determinação das propriedades termodinâmicas dos produtos de combustão durante a realização deste trabalho. Maiores detalhes podem ser encontrados na referência [56].

Tomou-se como base para o cálculo das propriedades de cada gás os dados presentes nas tabelas JANAF [74], reconhecidamente uma das mais citadas fontes no estudo de propriedades termodinâmicas [55, 60, 61, 62]

Em uma primeira análise, poder-se-ia sugerir a determinação destas propriedades adotando-se diretamente seus valores tabelados. Todavia, tendo-se em mente a construção de programas computacionais para a simulação de processos de combustão, esta estratégia demandaria o extenuante armazenamento das diversas tabelas contendo as propriedades termodinâmicas de interesse.

Para contornar esta dificuldade, é usual o ajuste dos dados tabelados para o calor específico a pressão constante em base molar [59, 62]. Esta abordagem é particularmente interessante, pois todas as demais propriedades termodinâmicas de importância podem ser facilmente obtidas, através da manipulação matemática da expressão para o calor específico, conforme evidenciam as equações abaixo.

$$\bar{h}_i(T) = \bar{h}_{f,i}^0 + \Delta h|_0^{T_0} + \int_{T_0}^T \bar{Cp}_i \cdot dT \quad (4.37)$$

$$\bar{s}_{0i}(T) = \bar{s}_{0i}(T_0) + \int_{T_0}^T \left(\frac{\bar{Cp}_i}{T} \right) \cdot dT \quad (4.38)$$

$$\bar{g}_{0i}(T) = \bar{h}_i(T) - T \cdot \bar{s}_{0i}(T) \quad (4.39)$$

sendo

$\overline{h_i(T)}$	entalpia em base molar da substância química i (J/mol);
$\overline{h_{f,i}^0}$	entalpia de formação em base molar a 0K da substância i (J/mol);
$\overline{\Delta h _0^{T_0}}$	variação de entalpia em base molar de 0K a T_0 para a substância i (J/mol);
$\overline{Cp_i}$	calor específico a pressão constante em base molar da substância i (J/mol.K);
$\overline{s_{oi}(T)}$	entropia específica em base molar da substância i (J/mol.K);
$\overline{g_{oi}(T)}$	energia livre de Gibbs específica em base molar da substância i (J/mol).

O calor específico molar a pressão constante possui comportamento distinto entre as áreas de alta e baixa temperatura. Este comportamento dificulta substancialmente a obtenção de resultados adequados a partir de sua interpolação por funções polinomiais [55, 73]. Desta forma realizou-se uma análise regressional dos dados disponíveis para esta propriedade termodinâmica, buscando-se uma única função de interpolação adequada para toda a faixa de temperaturas de interesse. Sob esta abordagem, obteve-se uma expressão funcional que combina parcelas polinomiais e transcendentais, válida para toda a faixa de temperaturas de interesse e de elevada precisão [56].

$$\overline{Cp_i} = a_0 + \sum_{j=1}^6 (a_{ji} \cdot \tau^j) + a_7 \cdot 10^{-1,1\tau} + a_8 \cdot \ln(10 \cdot \tau) + a_9 \cdot e^{-0,9\tau} + a_{10} \cdot e^{-10\tau} \quad (4.40)$$

sendo $\tau = T/1000$ com T expressa em Kelvins.

As demais propriedades termodinâmicas dos produtos de combustão podem ser mensuradas através da aplicação da expressão acima nas equações (4.37-4.39). Os valores das constantes a_0, a_1, \dots, a_{10} , variam de acordo com cada produto de combustão de índice i , sendo determinados através da aproximação dos dados reportados nas tabelas [74] pela Equação 4.40. Para efetuar estas interpolações empregou-se o método dos mínimos quadrados [37]. Os detalhes da obtenção destas constantes, bem como da Equação 4.40 encontram-se listados na referência [56].

4.4.5 As propriedades do fluido de trabalho e suas derivadas

Conforme mencionado no início deste capítulo, durante a aplicação da primeira lei da termodinâmica em modelos fenomenológicos faz-se necessário o conhecimento preciso das propriedades termodinâmicas do fluido de trabalho, além de suas derivadas com relação a variáveis como a temperatura, pressão e relação mássica entre combustível queimado e ar.

Mediante o conhecimento da composição do fluido de trabalho, através das frações molares de seus constituintes ($x_1 \dots x_{15}, x_{fu}$), pode-se escrever para as suas propriedades as seguintes equações:

$$M(T, p, \phi, \phi_b) = \sum_{i=1}^{i=16} x_i \cdot M_i + x_{fu} \cdot M_{fu}$$

$$h(T, p, \phi, \phi_b) = \frac{\sum_{i=1}^{i=16} x_i \cdot \bar{h}_i + x_{fu} \cdot \bar{h}_{fu}}{M_m}$$

$$Cp(T, p, \phi, \phi_b) = \frac{\sum_{i=1}^{i=16} x_i \cdot \bar{Cp}_i + x_{fu} \cdot \bar{Cp}_{fu}}{M_m}$$

$$R(T, p, \phi, \phi_b) = \frac{\bar{R}}{M_m}$$

$$u(T, p, \phi, \phi_b) = h_m - R_m \cdot T$$

sendo

M	massa molar da mistura de gases ideais que compões o fluido de trabalho (kg/mol);
h	entalpia da mistura de gases ideais que compões o fluido de trabalho (J/kg);
C_p	calor específico a pressão constante da mistura de gases ideais que compões o fluido de trabalho (J/kg.K);
R	constante dos gases ideais da mistura que compões o fluido de trabalho (J/kg.K);
u	energia interna da mistura de gases ideais que compões o fluido de trabalho (J/kg);
M_{fu}	massa molar do combustível não reagido no fluido de trabalho (kg/mol);
h_{fu}	entalpia do combustível não reagido no fluido de trabalho (J/mol);
$C_{p_{fu}}$	calor específico do combustível não reagido no fluido de trabalho (J/mol.K);

As derivadas das propriedades termodinâmicas do fluido de trabalho foram obtidas a partir de aproximação por diferenças finitas a jusante [72].

$$\frac{d}{dT} [\Psi_m(T, p, \phi, \phi_b)] = \frac{\Psi_m(T + \Delta T, p, \phi, \phi_b) - \Psi_m(T, p, \phi, \phi_b)}{\Delta T}$$

$$\frac{d}{dp} [\Psi_m(T, p, \phi, \phi_b)] = \frac{\Psi_m(T, p + \Delta p, \phi, \phi_b) - \Psi_m(T, p, \phi, \phi_b)}{\Delta p}$$

$$\frac{d}{d\phi} [\Psi_m(T, p, \phi, \phi_b)] = \frac{\Psi_m(T, p, \phi + \Delta\phi, \phi_b) - \Psi_m(T, p, \phi, \phi_b)}{\Delta\phi}$$

$$\frac{d}{d\phi_b} [\Psi_m(T, p, \phi, \phi_b)] = \frac{\Psi_m(T, p, \phi, \phi_b + \Delta\phi_b) - \Psi_m(T, p, \phi, \phi_b)}{\Delta\phi_b}$$

sendo

Ψ	propriedade termodinâmica da qual se deseja a derivada;
ΔT	diferencial de temperatura adotado pela aproximação;
Δp	diferencial de pressão adotado pela aproximação;
$\Delta\phi$	diferencial de relação mássica adotado pela aproximação;

Os valores adotados para os diferenciais de temperatura, pressão e relação de equivalência foram:

$$\Delta T = 5 \text{ K};$$

$$\Delta p = 1.000,00 \text{ Pa};$$

$$\Delta \phi = \Delta \phi_b = 0,001.$$

O critério de seleção destes valores foi sua redução até que as derivadas das propriedades termodinâmicas se tornassem totalmente independentes de sua variação. Durante a obtenção destas derivadas, as substâncias modeladas por cinética química reduzida (NO e possivelmente CO) permanecem com sua concentração inalterada. A influência da não variação destas substâncias foi desprezada neste trabalho, tendo-se em vista sua pequena participação na determinação das propriedades do fluido de trabalho, devido às suas baixas concentrações.

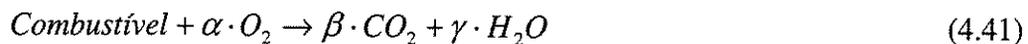
Normalmente, os programas de cálculo de misturas em equilíbrio químico computam as derivadas das propriedades do fluido de trabalho através de expressões analíticas [25, 59], obtidas a partir das frações molares dos produtos de combustão. A abordagem numérica adotada neste trabalho justifica-se, novamente, no interesse da facilitação de modificações em substâncias químicas e equações computadas.

4.5 A validação da rotina de equilíbrio parcial

Durante o transcorrer deste trabalho utilizou-se deliberadamente a hipótese de que as reações envolvendo os produtos da queima dos combustíveis em estudo formassem uma mistura de gases em equilíbrio químico, sendo aberta uma exceção somente para o óxido de nitrogênio. Guardou-se para o item que segue a abordagem da extensão das imprecisões causadas por esta hipótese. Também será efetuada uma comparação entre resultados para a composição do fluido de trabalho utilizando-se um modelo de cinética química, e resultados fornecidos sob a hipótese de equilíbrio parcial. Esta comparação servirá como subsídio para a validação numérica do modelo descrito neste capítulo.

Conforme se discorreu anteriormente, os esquemas de cinética química global de um passo são largamente utilizados durante as simulações de escoamentos reativos em motores de combustão interna [14]. Isto se deve a associação de termos de flutuação de temperatura, característicos de problemas turbulentos, com as diferentes escalas de tempo das várias reações elementares necessárias para caracterizar a combustão de um hidrocarboneto. Desta forma dificulta-se substancialmente a adoção de um esquema com maior fundamentação teórica, baseado em diversas reações químicas elementares [14]. Na verdade, até mesmo modelos contando com somente quatro reações globais mostram-se demasiadamente onerosos computacionalmente para este propósito, inviabilizando sua adoção durante a simulação de motores de combustão interna [48].

Westbrook e Dryer [42] modelaram o processo de queima para alguns combustíveis através de um mecanismo detalhado de cinética química, envolvendo inúmeras espécies e reações. Cientes da necessidade de se exprimir, de forma simplificada, a composição dos gases envolvidos nas reações de queima de um combustível, estes autores apresentam também um mecanismo global de um passo para modelar tais reações. Assim, uma única reação química irreversível é utilizada para modelar a oxidação do combustível, formando como produtos água e dióxido de carbono. A Equação (4.41) ilustra esta reação.

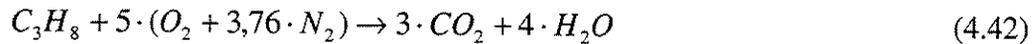


Decidiu-se por validar o modelo de equilíbrio parcial apresentado no capítulo anterior através de sua comparação com o esquema de cinética global de um passo citado acima. A escolha deste modelo de cinética química deveu-se à sua proeminente utilização, além de sua grande simplicidade.

4.5.1 A queima estequiométrica do propano (C_3H_8)

Escolheu-se como o caso a ser estudado durante esta comparação um sistema fechado, no qual 1 mol de propano (C_3H_8) encontra-se misturado homogeneamente com 5 mols de ar, em um instante inicial ($t = 0$). Tanto o combustível e o ar, quanto os produtos de sua reação de combustão serão considerados gases ideais. O estado termodinâmico da mistura será considerado constante durante a queima, com pressão de 1 atm e temperatura de 1500 K. Considera-se também que a mistura permaneça homogênea durante toda a combustão.

A reação global de queima do propano será dada, nas condições mencionadas acima, por:



Sendo a taxa global de consumo do combustível associada a esta reação dada, segundo Westbrook e Dryer [42], por:

$$\frac{d}{dt}([C_3H_8]) = -8,6 \cdot 10^{11} \cdot e^{\frac{-30.000,00}{1,987 \cdot T}} \cdot [C_3H_8]^{0,1} \cdot [O_2]^{1,65} \quad (4.43)$$

sendo

$[C_3H_8]$ concentração, em $gmol/cm^3$, de propano na mistura;

$[O_2]$ concentração, em $gmol/cm^3$, de oxigênio na mistura.

De acordo com a Equação 4.42, pode-se escrever para as concentrações de propano, oxigênio e dos produtos de combustão as seguintes relações:

$$[C_3H_8] = [C_3H_8]_0 + \int_{t=0}^t \frac{d}{dt}([C_3H_8]) \quad (4.44)$$

$$[O_2] = 5,00 \cdot [C_3H_8] \quad (4.45)$$

$$[CO_2] = -3,00 \cdot ([C_3H_8] - [C_3H_8]_0) \quad (4.46)$$

$$[H_2O] = -4,00 \cdot ([C_3H_8] - [C_3H_8]_0) \quad (4.47)$$

$$[C_3H_8]_0 = \frac{x_{f,0} \cdot P}{83,138 \cdot 10^5 \cdot T}$$

sendo

- $[C_3H_8]_0$ concentração inicial, em $gmol/cm^3$, de propano na mistura;
 $[CO_2]$ concentração, em $gmol/cm^3$, de dióxido de carbono na mistura;
 $[H_2O]$ concentração, em $gmol/cm^3$, de água na mistura;
 $x_{f,0}$ fração molar de combustível no fluido de trabalho em $t = 0$.

A solução das equações (4.44), (4.45), (4.46) e (4.47) ao longo do tempo, mediante o emprego de um algoritmo do tipo Runge-Kutta [37], irá proporcionar a composição do fluido de trabalho prevista pelo modelo de cinética global de um passo.

A aplicação do esquema de equilíbrio parcial para a determinação da composição do fluido de trabalho implica o conhecimento da temperatura, pressão e relações de equivalência (ϕ , ϕ_b), as quais a mistura estará submetida. As relações de equivalência relativas as massas de combustível queimado e total poderão ser modeladas a partir da Equação 4.44, para a queima estequiométrica, como:

$$\phi_b = \phi - \left\{ \frac{[C_3H_8]_0 + \int_{t=0}^t \frac{d}{dt}([C_3H_8])}{[C_3H_8]_0} \right\} = \frac{- \int_{t=0}^t \frac{d}{dt}([C_3H_8])}{[C_3H_8]_0} \quad (4.48)$$

sendo

$$\phi = 1,00$$

Desta maneira reuniram-se todos os subsídios necessários à comparação entre as abordagens de cinética química global e equilíbrio parcial. Os resultados obtidos nesta comparação são indicados na Figura 4.1, correspondendo à variação das frações molares dos constituintes do fluido de trabalho entre o instante inicial e o tempo necessário para o consumo de 99% do combustível.

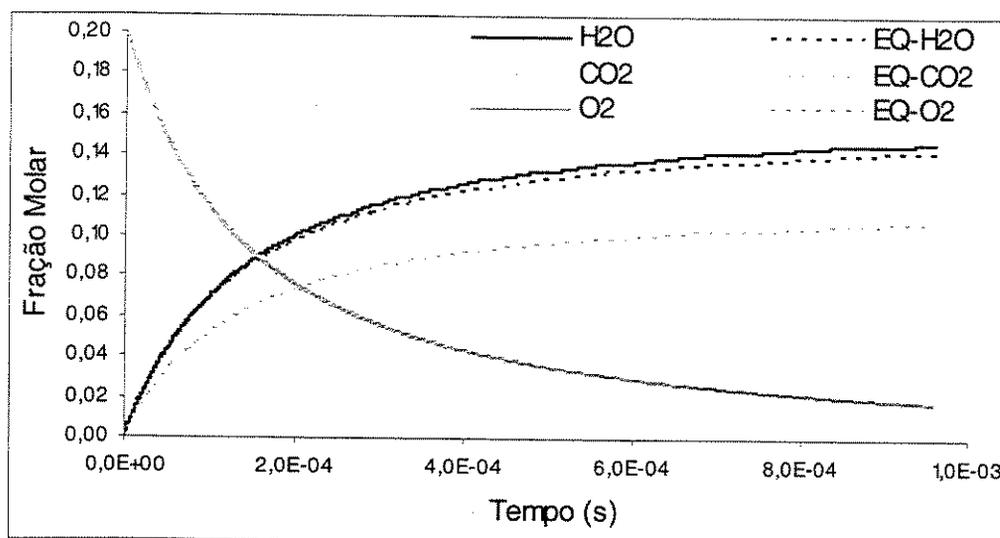


Figura 4.1: Frações molares dos produtos de combustão.

Pode-se notar um pequeno distanciamento, a partir de $t = 0,2$ ms instante correspondente a $\phi_b = 0,6$, entre as frações molares de água e dióxido de carbono previstas pelos esquemas de equilíbrio parcial e cinética química global. Obviamente, o modelo de reação de um passo não considera, de forma direta, a formação e destruição do monóxido de carbono. Isto advém da formulação baseada na oxidação completa do combustível.

Já o esquema de equilíbrio parcial prevê a formação e destruição, ainda que com velocidades de reação consideravelmente irreais, do monóxido de carbono. Portanto as frações molares da água (H₂O), do dióxido de carbono (CO₂) e do hidrogênio (H₂), produtos de combustão diretamente envolvidos na equação de equilíbrio água-gás (4.4), serão intimamente influenciadas pela presença do monóxido de carbono em equilíbrio químico. Isto representa algum avanço em relação aos esquemas de cinética global de um passo, porém a correta descrição do fluido de trabalho demandará a mensuração da cinética química do monóxido de carbono.

Devido à ausência da consideração direta do monóxido de carbono, mencionada acima, Bracco e Reitz [75] demonstraram que reações globais de um passo são coerentes no modelamento da composição do fluido de trabalho apenas nas situações envolvendo relações de equivalência inferiores a estequiométrica. De forma conservadora, pode-se estender este diagnóstico à abordagem de equilíbrio parcial sugerida neste capítulo, descartando-se sua utilização com relações de equivalência maiores que um. Combinando-se estas restrições aos campos de interpolação das expressões para o calor específico a pressão constante, pode-se afirmar que as condições nas quais o modelo de equilíbrio parcial será válido, com o intuito de se determinar as propriedades do fluido de trabalho, são:

$$0 \leq \phi_b \leq 1$$

$$0 \leq \phi \leq 1$$

$$200 \leq T \leq 3000$$

Felizmente, conforme se colocou no capítulo 2, os motores diesel costumam trabalhar com relações de equivalência médias consideravelmente abaixo da estequiométrica, possibilitando-se a utilização de esquemas de cinética reduzida de um passo, ou de equilíbrio parcial, durante a averiguação das propriedades do fluido de trabalho em modelos de uma zona de combustão.

Através desta breve análise, pôde-se assegurar a pertinência da utilização do modelo de equilíbrio parcial proposto neste capítulo, no tocante a determinação das propriedades do fluido de trabalho, em modelos de uma zona de combustão para motores diesel. Estes resultados já eram esperados, pois diversos trabalhos [32, 51, 52, 53, 54] empregaram com sucesso aproximações semelhantes durante a simulação de motores de ciclo diesel.

Ademais, com o intuito de se modelar de maneira mais realista a presença do monóxido de carbono durante a combustão, Westbrook e Dryer [42] sugeriram a adoção de esquemas baseados em equilíbrio químico, com a variação da taxa de equivalência dada por expressões como a Equação 4.48. Desta recomendação surgiu a essência e a motivação para a construção do modelo de equilíbrio parcial, descrito neste capítulo.

Também se confirma neste capítulo, de maneira indireta e imprecisa, a reportada [14] influência da cinética química na concentração do monóxido de carbono nos produtos de combustão. Desta sorte, deve-se proceder com prudência durante a utilização do esquema de equilíbrio parcial em modelos multizonais, principalmente em zonas com relações de equivalência superiores a unidade.

CAPÍTULO 5

O Tratamento Numérico dos Dados de Pressão

A confiabilidade dos resultados alcançados através de estudos baseados na liberação de energia, obtidos mediante a aplicação de um modelo de uma zona de combustão, encontra-se intimamente relacionada à qualidade dos dados levantados para a pressão média no cilindro e a seu tratamento adequado, conforme será descrito ao longo deste capítulo.

Sabe-se que a primeira derivada da pressão média, com relação ao ângulo de manivela, possui pronunciada influência sobre a morfologia das curvas de liberação de energia [13]. Esta influência pode ser verificada pela análise da Figura 5.1, ressaltando-se a correspondência entre o acréscimo de liberação de energia sob a predominância da combustão pré-misturada, e o sobressalto na curva da derivada da pressão média no cilindro. Portanto, cria-se um forte vínculo entre a suavidade da curva de pressão, além de sua derivada, e a ausência de espúrios no diagrama de liberação de energia obtido a partir destas curvas.

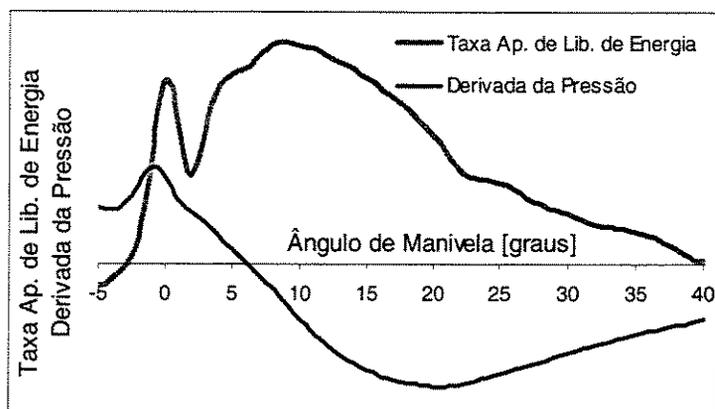


Figura 5.1: Influência da derivada da pressão no cilindro sob a liberação de energia.

Todavia a instrumentação instalada no motor é capaz de fornecer apenas o diagrama de pressão, restando a adoção de algum procedimento numérico para a obtenção da sua derivada. Some-se a isto o fato de que pequenas oscilações nos dados de pressão serão amplificadas, de maneira considerável, durante sua derivação numérica, causando apreciável instabilidade nas curvas de derivada de pressão. Estas rápidas constatações exemplificam a necessidade de um tratamento criterioso para os diagramas experimentais de pressão no cilindro do motor.

5.1 Dificuldades relatadas na avaliação dos dados de pressão

Algumas dificuldades relacionadas à obtenção de valores confiáveis para a pressão média no interior do cilindro, como o ruído gerado pela instrumentação, existência de fenômenos acústicos na câmara de combustão, baixa resolução do sistema de coleta de dados, variações aleatórias dos diagramas de pressão de ciclo para ciclo, além da não uniformidade da pressão no fluido de trabalho são comumente relatadas pela literatura [13, 76, 77, 78]. Desta forma, sugerem-se inúmeras causas para a presença de ruído no sinal obtido para a pressão no interior do cilindro.

Conforme se verificará no item 5.3 deste capítulo, de maneira independente da coerência das variadas causas citadas na literatura para tal ruído, a presença de um pequeno erro relacionado à resolução da instrumentação utilizada no levantamento dos dados de pressão, muito comum nos sistemas que utilizam a conversão de sinais analógicos para digitais, será capaz de introduzir razoável imprecisão nos diagramas de liberação de energia.

Devido à não eliminação destes componentes de natureza espúria dos dados experimentais de pressão, pode-se observar em alguns trabalhos a presença de sobressaltos e pequenos picos na taxa aparente de liberação de calor, em sua grande maioria atribuídos à presença dos fenômenos indesejados citados acima. Longe de ter importância apenas estética, o adequado tratamento numérico das curvas de liberação de calor facilita a sua comparação a modelos como as funções de Wiebe [21], que podem ser utilizadas como um padrão durante a determinação das proporções de combustão pré-misturada e difusiva. Outro aspecto que ressalta a importância da ausência de perturbações nestas curvas é a facilidade com que as oscilações mencionadas acima levam a constatações equivocadas, principalmente quanto à presença ou não de liberação de energia em instantes caracterizados por ângulos de manivela afastados do ponto morto superior.

5.2 A obtenção experimental dos dados de pressão

Os dados de pressão média, utilizados no presente estudo, foram retirados de ensaios em bancada em um motor MWM 6.07T GMT 400 de quatro tempos e injeção direta, empregando-se um transdutor de pressão piezelétrico (da marca AVL, modelo GMD-12) e o sistema de aquisição de dados Indimeter 617-AVL. Os ensaios foram realizados no Laboratório de Termodinâmica Aplicada da PUC-PR, utilizando-se um dinamômetro da marca ZÖLLNER, modelo ALFA 160.

Detalhes sobre a montagem experimental podem ser encontrados na referência [79]. Para cada regime de operação em estudo, aguardou-se que o motor alcançasse a condição de regime permanente, mensurada através da estabilização da temperatura do líquido de refrigeração, para que os diagramas de pressão fossem levantados.

Deve-se salientar que estudos de liberação de energia em motores turbo-alimentados constituem uma tarefa de difícil execução. A variação da pressão de alimentação do motor, de acordo com o regime instantâneo de operação da turbina, possui apreciável efeito sob o atraso de ignição do motor em estudo. Mesmo em motores aspirados, as condições termodinâmicas durante a ignição da mistura combustível podem ser alteradas devido às trocas térmicas nas superfícies internas do motor, bem como por variações da quantidade de gases residuais presentes no fechamento da válvula de admissão [48]. Obviamente, tais modificações nas condições experimentadas pelo motor durante a fase de atraso da ignição, que possui apreciável influência sob os processos de queima subsequentes, acarretarão variações nos diagramas de pressão de ciclo a ciclo.

Para se realizar estudos de liberação de energia evitando-se a influência destes fenômenos pode-se utilizar, ao invés de um motor, uma máquina de compressão rápida (RCM) [28, 33]. Neste tipo de máquina o estado termodinâmico do fluido de trabalho, no instante do início da injeção de combustível, pode ser precisamente controlado. Desta maneira pode-se obter adequada concordância entre os diagramas de liberação de energia obtidos em ensaios seqüenciais [28, 33].

Reconhecidamente [78], a forte presença de variações de ciclo a ciclo nos diagramas de pressão pode ser associada aos motores de injeção indireta, sendo os motores de injeção direta, em sua grande maioria, caracterizados pela presença inexpressiva destas variações. Desta maneira, para casos em que se estudam motores de injeção direta, a influência das variações de ciclo a ciclo nos dados de pressão pode vir a ser desprezível. Todavia, mesmo em estudos

realizados com motores de injeção direta [76,77,78], é usual se utilizar diagramas de pressão obtidos pela adoção de valores médios entre dezenas de ciclos, visando-se amenizar os efeitos de possíveis variações como as mencionadas acima. Em virtude de problemas ocorrentes no sistema de aquisição de dados Indymeter, não será efetuado, no presente trabalho, o estudo do tratamento numérico dos dados de pressão obtidos mediante a adoção de valores médios entre diversos ciclos.

Outra abordagem passível de utilização é a construção de diagramas de liberação de energia a partir de dados de pressão obtidos em um único ciclo. Pode-se, por exemplo, utilizar tais diagramas justamente para se mensurar a estabilidade dos dados de pressão e liberação de energia ao longo de sucessivos ciclos. Pode-se, ainda, aproveitar esta abordagem em situações nas quais o regime de operação e o motor em estudo assegurarem a estabilidade destes dados de ciclo a ciclo. Por possuir injeção direta, e alta taxa de misturação (swirl) em sua câmara de combustão [80], o motor em estudo apresentou diagramas de pressão nos quais tal variação é desprezível, conforme indica a Figura 5.2. Desta forma, utilizaram-se diagramas de pressão obtidos durante um único ciclo para a realização dos estudos apresentados no presente trabalho.

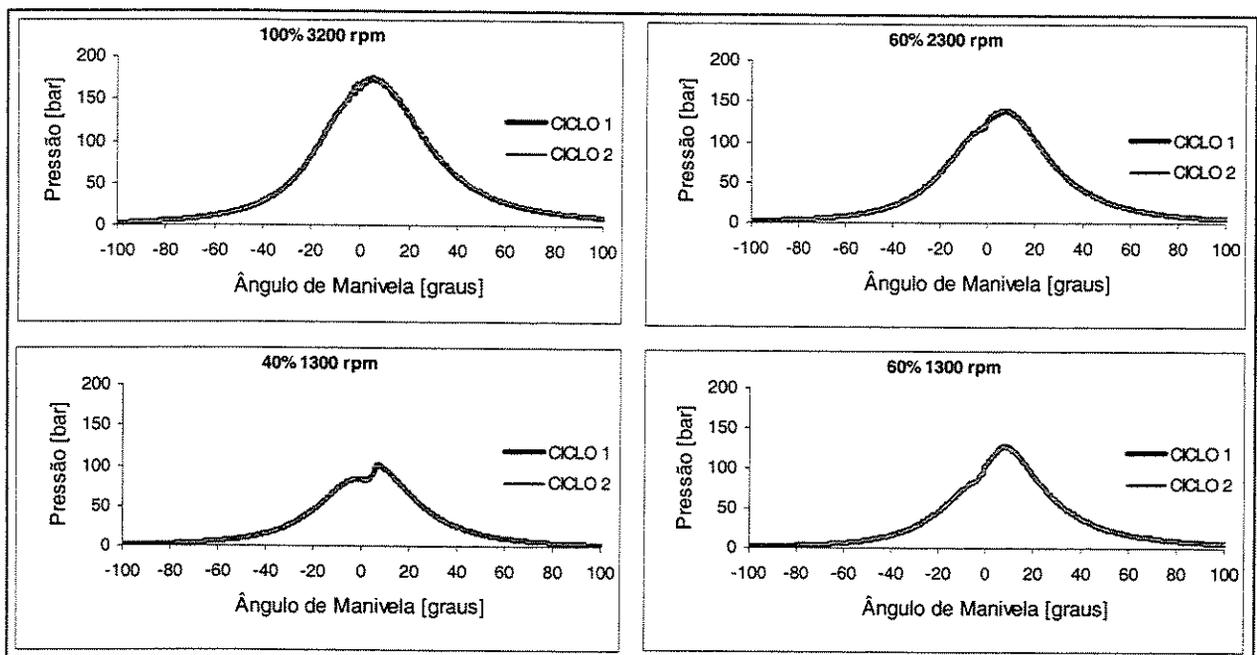


Figura 5.2: Variações nos diagramas de pressão entre dois ciclos não consecutivos.

5.3 As flutuações nos dados de pressão

Será conduzido, a seguir, um breve estudo com objetivo de se determinar a natureza dos espúrios presentes nos dados de pressão no interior do cilindro do motor. Escolheu-se para tal propósito a apreciação de diagramas de pressão obtidos para apenas um ciclo, preservando-se assim o ruído original mensurado durante a aquisição dos dados, sobreposto aos dados da pressão média no interior do cilindro.

Para o caso em que se considerem diagramas obtidos a partir da média entre diversos ciclos, uma parte apreciável dos espúrios presentes em tais diagramas será amortecida pela justaposição dos dados médios, além do ruído, presentes em cada ciclo. Caso tais espúrios se tratassem de um ruído branco, por exemplo, esta simples justaposição asseguraria sua anulação. Todavia, conforme se verificará adiante, o ruído presente nos dados em estudo não se distribui aleatoriamente ao longo de todo o espectro de frequências, tal como o ruído branco. Na realidade, os espúrios em questão sofrem apreciável influência dos fenômenos acústicos resultantes do acréscimo abrupto da pressão no interior da câmara de combustão, ocorrente durante a queima pré-misturada.

A Figura 5.3 apresenta diagramas experimentais típicos para a pressão e sua derivada, obtidos para o motor MWM Sprinter submetido ao regime de plena carga e 3200 rotações por minuto, utilizando-se a mistura B20 (80% de diesel + 20% de etil-éster de soja em volume) como combustível. Destaca-se nesta figura a apreciável presença de oscilações na derivada de pressão, a partir do ponto de crescimento abrupto da pressão no cilindro.

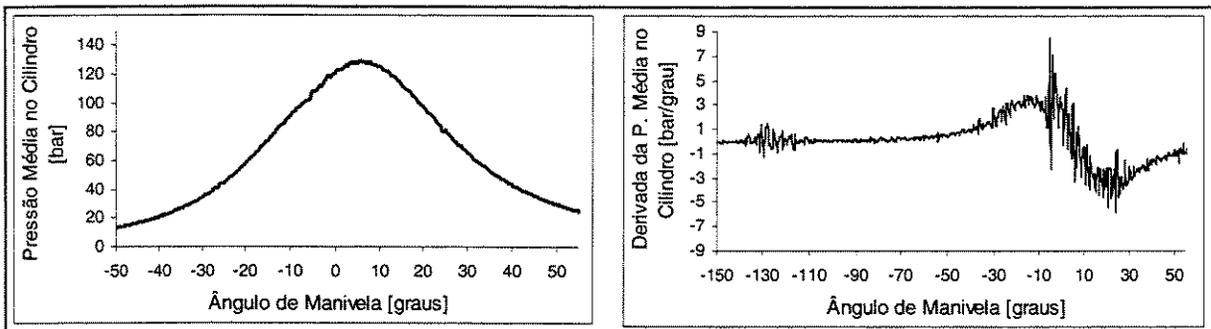


Figura 5.3: Dados obtidos para a pressão e sua derivada.

Ao se analisar a natureza dos espúrios presentes nos dados experimentais, mostrados na Figura 5.3, a sua simples observação no domínio do tempo mostrou-se de pouca valia, sendo interessante seu estudo no domínio da frequência.

Para dar curso a este exame, obteve-se o periodograma de Lomb [81] da curva da derivada de pressão indicada na Figura 5.3, apresentado na Figura 5.4. Neste periodograma são indicadas as potências espectrais normalizadas de cada frequência, que podem ser compreendidas como o grau de participação destas frequências na composição do sinal em estudo. Os periodogramas de Lomb utilizados no presente documento serão apresentados em duas partes. A primeira figura ilustra detalhadamente o comportamento da região de baixas frequências; e a segunda a região de altas frequências do periodograma.

Através do trabalho relacionando o som produzido durante a combustão em um motor diesel e a razão de subida da pressão neste motor, conduzido por Priede [78], pôde-se constatar que a região de baixa frequência do periodograma apresentado na Figura 5.4 está relacionada ao pico de pressão exibido pelo diagrama da Figura 5.3, enquanto a região de alta frequência é dependente da configuração, ou razão de subida, com que a pressão alcança tal pico. A presença de combustão rápida durante o mecanismo pré-misturado fará com que a pressão no cilindro alcance este pico de forma consideravelmente abrupta, iniciando a propagação de pronunciados fenômenos ondulatórios na câmara de combustão [78]. Pode-se ainda constatar, no estudo conduzido por Priede [78], que a frequência destas oscilações está relacionada com a geometria da câmara de combustão do motor em estudo, e que para motores de injeção direta, ela se encontra próxima dos 5000 Hz.

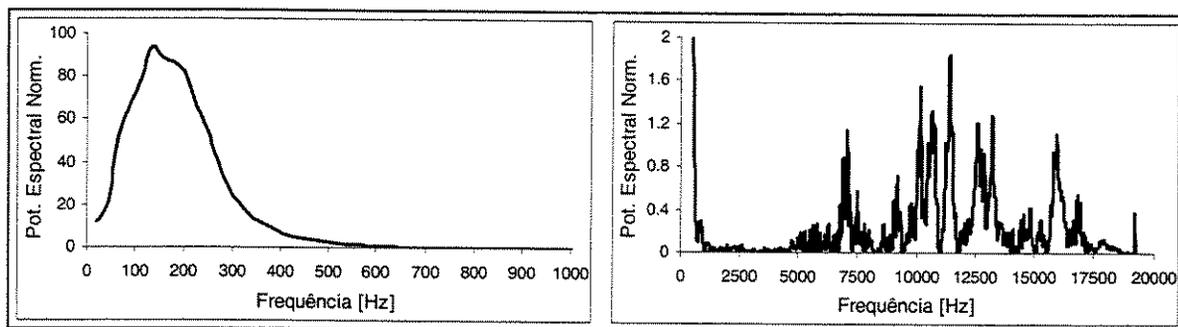


Figura 5.4: Periodograma de Lomb para os dados experimentais da derivada da pressão.

A presença de flutuações aleatórias na pressão do cilindro também foi relacionada ao processo de combustão em motores diesel no trabalho de Strahle e co-autores [82, 83, 84]. Segundo estes autores, fenômenos de natureza aleatória dominam a composição do histórico da pressão no cilindro para frequências a partir dos 1000 Hz.

Além dos fenômenos acústicos relacionados a queima pré-misturada, a presença de turbulência na câmara de combustão também é responsável por variações randômicas de pressão no cilindro. Todavia, pode-se constatar que as instabilidades presentes nos diagramas de pressão e sua derivada tornam-se pronunciadas logo após a ignição da mistura combustível, evidenciando a participação secundária das flutuações turbulentas na composição destas variações de pressão, embora por toda a extensão dos dados [82].

Com o intuito de se estudar os fenômenos acústicos em motores de injeção direta a câmara de combustão pode ser grosseiramente aproximada, durante a ignição da mistura combustível, por um cilindro com suas duas extremidades fechadas. Como o gás enclausurado na câmara de combustão possui seus modos naturais de vibração, espera-se que um acréscimo abrupto da pressão em uma localidade desta câmara, ocorrendo em um intervalo de tempo inferior ao caracterizado por seus modos naturais, venha a excitar oscilações neste gás. É razoável considerar que estas oscilações constituam a maior fonte de instabilidades para os dados de pressão mensurados no cilindro.

Para o motor utilizado no presente trabalho, o qual possui uma câmara de combustão de formato complexo, pode-se definir uma geometria equivalente baseada no cilindro idealizado acima, mantendo-se o volume original da câmara de combustão. Considerando-se esta geometria, e para as propriedades do fluido de trabalho em condições próximas as da ignição, as frequências admissíveis para ondas estacionárias na câmara de combustão são 6.363, 12.727 e 19.091 Hz para o primeiro, segundo e terceiro harmônicos. Estes valores encontram-se na região de altas frequências, habitualmente relacionadas as variações aleatórias da pressão no cilindro [78, 82, 83, 84].

Pode-se observar, através da Figura 5.4, a presença de valores relativamente altos para a potência espectral em frequências próximas das relatadas para o ar confinado em um tubo com as extremidades fechadas. Os efeitos da natureza tridimensional dos fenômenos acústicos em estudo, combinados ao movimento das fronteiras do sistema formado pelo conjunto câmara de combustão, paredes do cilindro e cabeçote, fazem com que a influência destas oscilações seja distribuída de maneira consideravelmente mais complexa que a prevista pelo modelo aplicado acima. Desta maneira sugere-se que os fenômenos acústicos presentes na câmara de combustão estejam distribuídos, na composição dos dados experimentais de pressão, em frequências entre 6.000 e 19.000 Hz.

Outro componente de natureza espúria dos diagramas experimentais de pressão, com importante participação em sua degradação, é o erro incutido pela imprecisão do sistema de aquisição de dados. A frequência de aquisição dos dados de pressão é caracterizada pela rotação do motor e pela resolução do disco óptico utilizado para a mensuração do ângulo de manivela. Para o ensaio apresentado pela Figura 5.3, a frequência de aquisição de dados é de 19.200 Hz. Todavia, não se pode afirmar que o ruído presente nos dados de pressão, decorrente destas imprecisões, esteja confinado nas proximidades deste valor de frequência. Na realidade, conforme se verificará adiante no estudo de um caso de contaminação dos dados de pressão, este ruído está distribuído entre 2.000 e 20.000 Hz, de maneira semelhante as imprecisões decorrentes de fenômenos acústicos.

A esta altura pode-se incorrer no erro de se considerar que os fenômenos de natureza aleatória, descritos acima, são os componentes exclusivos do periodograma da derivada da pressão no cilindro para frequências a partir dos 2000 Hz. Na realidade, os fenômenos físico-químicos envolvidos na combustão pré-misturada também possuem tempos característicos relativamente reduzidos sendo, portanto, caracterizados pelo posicionamento na região de altas frequências do periodograma.

Alimentando-se o modelo preditivo, descrito no Capítulo 3, com dados suaves de liberação de energia levantados experimentalmente, obtiveram-se diagramas de pressão realísticos e livres dos espúrios em estudo. Desta maneira foram realizadas simulações considerando e suprimindo-se a combustão pré-misturada dos dados de liberação de energia, conforme se verifica na Figura 5.5. Possibilitou-se assim a identificação da influência dos fenômenos que compõe esta fase da combustão no domínio da frequência, através da comparação entre tais simulações. Os dados de liberação de energia utilizados nesta parte do trabalho foram obtidos a partir da aproximação de diagramas fornecidos pela aplicação do modelo de liberação de energia por funções de Wiebe, para o regime de operação de 2600 rotações e 60% de carga, caracterizado pela forte presença de combustão pré-misturada.

Observa-se, através da análise da Figura 5.5, a forte presença da influência da combustão pré-misturada nas regiões próximas a 150 Hz e na faixa entre 1.000 e 4.500 Hz. Conclui-se, portanto, que além dos espúrios indesejados nos dados experimentais de pressão, boa parte da combustão pré-misturada também se distribui ao longo da faixa considerada de alta frequência durante o presente estudo.

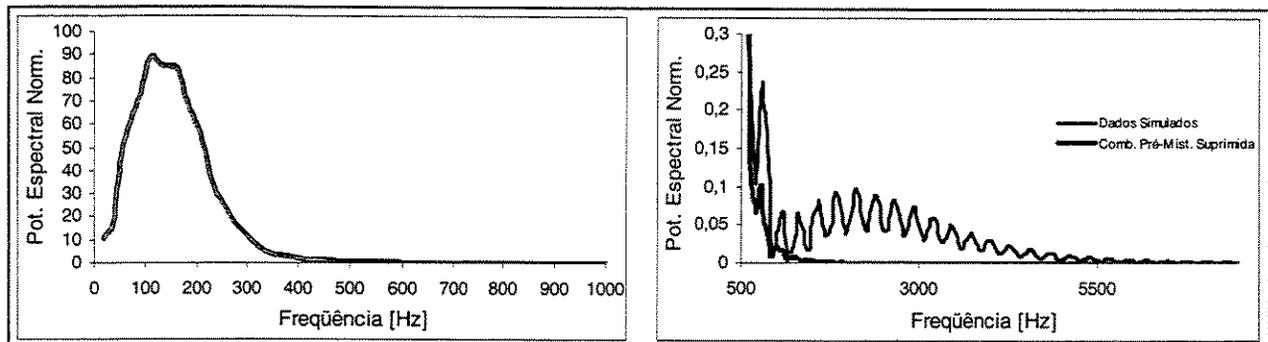


Figura 5.5: Caracterização da combustão pré-misturada no domínio da frequência.

5.4 Tratamento numérico de diagramas de pressão obtidos durante um ciclo

Através da análise apresentada no item anterior, constatou-se que os fenômenos ondulatórios decorrentes da combustão pré-misturada, além da imprecisão da instrumentação e do sistema de aquisição de dados utilizados, constituem as principais fontes de componentes transitórios sobrepostos à curva de pressão média no interior do cilindro e sua derivada em relação ao ângulo de manivela. Mencionou-se, durante a descrição do modelo de liberação de energia, o interesse nos valores médios das curvas mencionadas acima, propondo-se, portanto, a eliminação dos elementos transitórios supra citados através do tratamento numérico adequado dos dados de pressão. Deve-se ainda atentar para a preservação da morfologia original destes dados, especialmente no que tange a distinção entre o ruído a ser eliminado e os traços da combustão pré-misturada.

Para tal propósito, são comumente utilizadas rotinas de interpolação através de polinômios de Lagrange [13], splines cúbicas [76] ou B-splines computadas através do método dos mínimos quadrados [79]. Deve-se salientar que a interpolação por splines cúbicas, ou polinômios de Lagrange, dos dados de pressão não proporciona a adequada supressão do ruído contido nestas curvas. Isto se deve à interceptação dos valores pré-estabelecidos das funções descritas na Figura 5.3, mantendo seu formato escarpado, durante a aplicação destes métodos de interpolação [36]. Resultados obtidos mediante a utilização de esquemas de aproximação baseados no método dos mínimos quadrados também não se mostraram satisfatórios, sendo marcante a presença de pequenos sobressaltos e falsos picos de liberação de energia em trabalhos que fazem uso desta metodologia [36]. Um detalhado estudo comparativo, contendo diversas abordagens para o tratamento numérico dos dados experimentais de pressão, encontra-se disponível na referência [36].

Adotou-se, no presente trabalho, uma estratégia de filtragem inicial dos dados experimentais seguida por sua interpolação. Tal estratégia mostrou-se consideravelmente mais eficaz na eliminação do ruído e suavização dos diagramas de pressão que a interpolação direta [36]. Deve-se ainda mencionar que o tratamento de filtragem e interpolação será feito separadamente nos dados de pressão, obtidos diretamente dos ensaios, e em sua derivada, obtida numericamente por diferenças centrais com aproximação de quarta ordem [72].

Devido a sobreposição de dados de interesse durante o estudo de liberação de energia, referentes ao mecanismo pré-misturado de combustão, às informações de natureza espúria contidas nos diagramas experimentais de pressão, ocorrente na região entre 2.000 e 4.500 Hz do espectro de frequências que compõe estes dados, inviabilizou-se a utilização de estratégias de filtragem baseadas no bloqueio de determinadas frequências, como os filtros passa-baixa. Utilizou-se, portanto, uma estratégia de filtragem no domínio do tempo, empregando-se o filtro de Savitzky-Golay [24, 85]. Este filtro possui excelente desempenho durante a supressão dos espúrios em estudo, além de alta simplicidade de aplicação [36]. A ordem de aproximação utilizada pelo filtro (m), além do número de pontos computados a jusante e a montante de cada valor filtrado ($n_j = n_m = n$), constituem seus principais parâmetros de operação. Diminuindo-se a ordem de aproximação empregada, ou acrescentando-se o número de pontos computados pelo filtro, aumenta-se a supressão dos espúrios, bem como o amortecimento de morfologias escarpadas presentes nos valores médios dos dados filtrados [24].

Tal acréscimo de amortecimento é decorrente da atuação do filtro sob frequências mais baixas, para o caso de filtragem pesada, encampando inclusive a faixa de frequências entre 2.000 e 4.000 Hz, característica dos fenômenos ocorrentes na combustão pré-misturada. Deste modo desaconselha-se a adoção de filtragem pesada, caracterizada pela escolha de baixa ordem de aproximação e alto número de pontos durante o ajuste do filtro, em trechos do diagrama de pressão e sua derivada nos quais haja fortes sobressaltos em seus dados médios, como no trecho dominado pela combustão pré-misturada.

Por operar no domínio do tempo, este esquema de filtragem permite que se atue de maneira seletiva quanto ao mecanismo de combustão predominante. Desta maneira, adotou-se uma estratégia de filtragem pesada durante o tratamento da maior parte do diagrama de pressão, empregando-se filtragem leve somente para a região do diagrama de pressão em que ocorra a combustão pré-misturada. Em seguida, efetuou-se filtragem leve por toda a extensão dos dados, assegurando-se assim sua homogeneidade e suavidade.

Uma vez que os dados experimentais tenham sido adequadamente filtrados, eliminando-se grande parte dos espúrios neles contidos, deve-se interpolá-los a fim de se amenizar pequenas oscilações e eliminar quaisquer resíduos destes espúrios que resistiram a filtragem. Utilizou-se para tal propósito a interpolação por splines cúbicas suavizantes, baseada no algoritmo de Reinsch [86]. Os parâmetros de ajuste desta rotina são uma estimativa do desvio padrão em cada dado a ser interpolado (σ), além de um parâmetro de filtragem interno do algoritmo (SMPAR), cujo valor foi fixado como o número de pontos do diagrama de pressão.

A Figura 5.6 ilustra a estratégia de filtragem e interpolação descrita acima, a ser aplicada nos dados de pressão e em sua derivada. O ajuste dos parâmetros presentes nos algoritmos de filtragem e interpolação, cujos valores são apresentados nesta figura, baseou-se em um estudo de dados contaminados que será descrito no item posterior do presente trabalho.

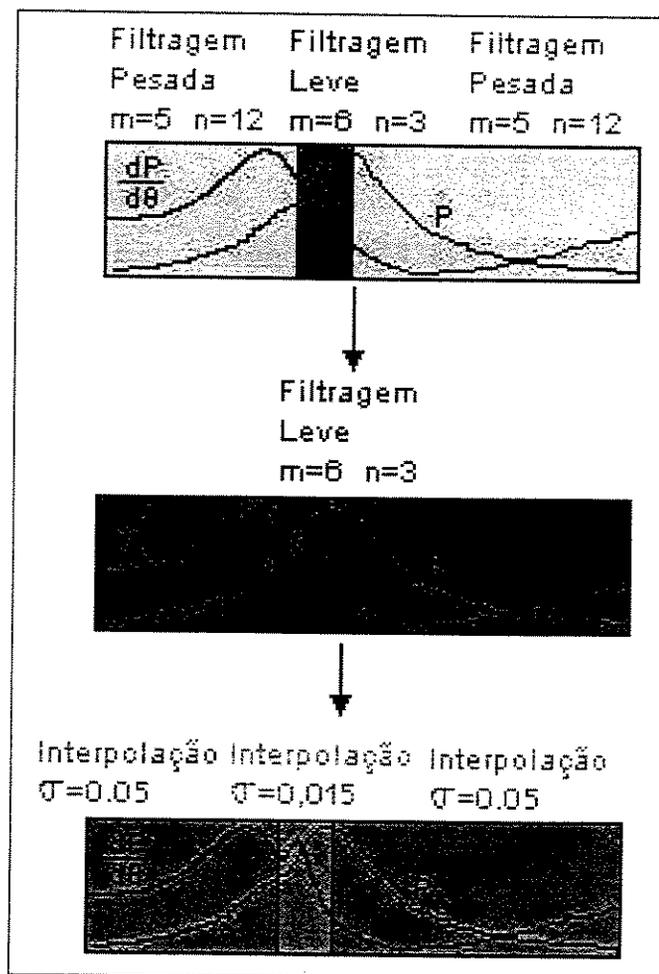


Figura 5.6: Tratamento dos dados de pressão.

A seguir, por meio das Figuras 5.7 e 5.8, serão apresentados os resultados obtidos através do tratamento numérico dos dados apresentados nas Figuras 5.3 e 5.4. Conforme mencionado, estes dados tiveram origem em medições de pressão efetuadas durante o ensaio em bancada do motor MWM Sprinter alimentado com a mistura B20, submetido ao regime de plena carga e 3200 rotações por minuto.

Na Figura 5.7 são apresentados os resultados obtidos mediante a análise espectral dos diagramas de pressão experimental e tratado. Pode-se observar, ainda nesta figura, a suave supressão e a adequada preservação da morfologia original do periodograma em frequências abaixo dos 4.500 Hz, combinada a forte eliminação dos dados em frequências superiores aos 5.000 Hz, obtida pela estratégia de filtragem descrita há pouco. Deste modo assegura-se a associação entre a integridade dos dados referentes ao diagrama de pressão média no cilindro e a eliminação dos espúrios abordados previamente.

Já na Figura 5.8, apresentam-se as curvas obtidas para a derivada da pressão no cilindro e para a taxa aparente de liberação de energia. Deve-se salientar a suavidade destas curvas, associada à sua elevada confiabilidade, atestada pela análise espectral proposta no presente capítulo e pela excelente concordância entre os dados de liberação de energia e o modelo de duas funções de Wiebe, conforme será exposto adiante.

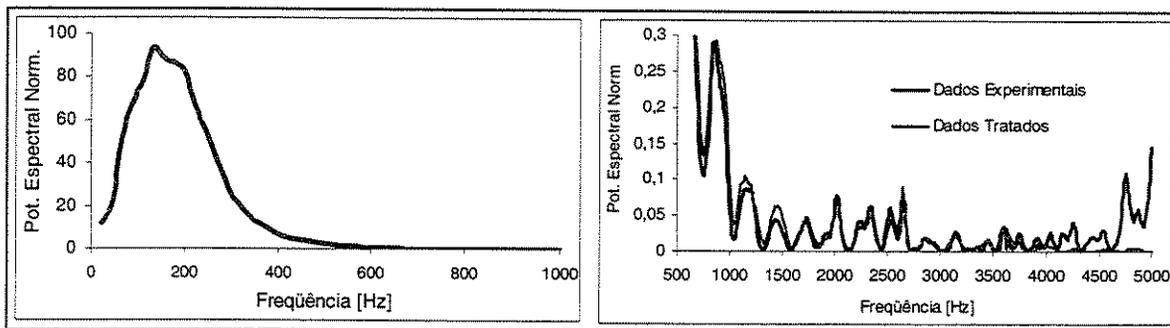


Figura 5.7: Periodograma de Lomb para o tratamento de dados experimentais.

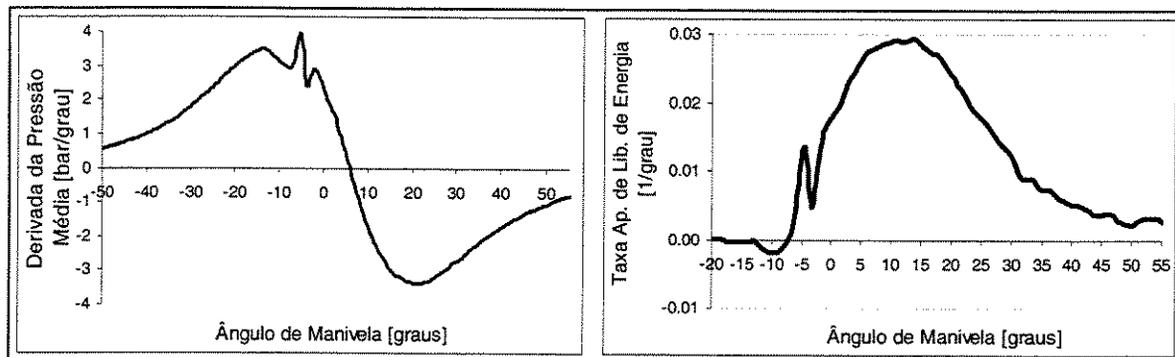


Figura 5.8: Resultados obtidos pela aplicação do tratamento proposto.

5.5 Estudo de um caso com espúrios artificiais

Conforme se mencionou, a obtenção de um conjunto seguro de parâmetros para as rotinas computacionais de filtragem e interpolação, descritas há pouco, demanda o estudo de um diagrama de pressão no qual os dados médios e os de natureza espúria sejam conhecidos. Empregou-se para tanto o diagrama de pressão média no cilindro corresponde a uma simulação preditiva criteriosa do motor MWM Sprinter, indicado na Figura 5.10, sob o regime de operação de 2600 rotações e 60% de carga. Este regime de operação foi escolhido por apresentar grande quantidade de combustão pré-misturada, cuja morfologia está sujeita a importantes deformidades nos casos em que se escolham parâmetros inadequados para seu tratamento numérico.

Já os dados de natureza espúria foram modelados como um ruído branco, cuja amplitude máxima é de 1% do valor médio da pressão acrescido de 0,2 bar, sendo esta amplitude máxima multiplicada por um número aleatório entre -0,5 e 0,5. Somando-se o valor da pressão média e do ruído para cada ponto no diagrama de pressão, obtiveram-se os diagramas apresentados na Figura 5.9.

A escolha do tipo e valor da amplitude do ruído introduzido na curva de referência buscou reproduzir as flutuações de pressão atribuídas ao erro de mensuração presente no sistema de aquisição de dados e a turbulência na câmara de combustão, baseando-se na observação de diversos diagramas de pressão. O efeito dos fenômenos acústicos na câmara de combustão sob o diagrama experimental de pressão não foi encampado nesta análise. A comparação entre as curvas apresentadas pelas Figuras 5.3 e 5.9 evidencia a concordância entre os espúrios reais e esta simulação, excluindo-se a região dos diagramas afetada pelos fenômenos acústicos citados acima.

A análise no domínio da frequência dos dados de pressão com espúrios artificiais, apresentada na Figura 5.9, fornece indícios de que a influência dos fenômenos citados acima está distribuída na faixa de frequências entre 2.000 e 20.000 Hz. Pode-se ainda observar que a potência espectral na faixa de frequências caracterizada pela presença maciça de dados espúrios apresentada nesta figura é da ordem de 1/20 da apresentada em um diagrama de natureza experimental, como o da Figura 5.7. Reitera-se, portanto, a predominância dos fenômenos acústicos na composição das flutuações de pressão presentes nos diagramas experimentais.

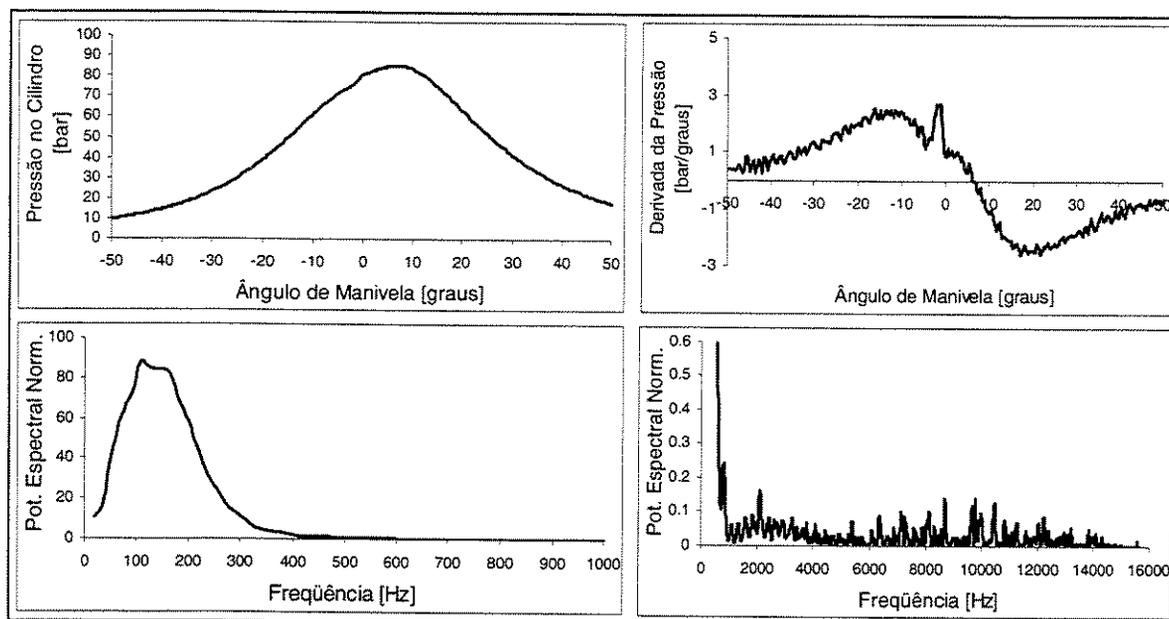


Figura 5.9: Efeito de imprecisões de medição na derivada da pressão no cilindro.

Uma vez obtido um diagrama de pressão com a curva média e flutuações conhecidas, dado pela Figura 5.9, pôde-se avaliar o efeito da variação dos diversos parâmetros presentes nos algoritmos de filtragem e interpolação, mediante sua aplicação na curva dita contaminada e subsequente comparação entre os resultados desta aplicação e os dados correspondentes a curva média. Estabeleceram-se como prioridades, durante esta busca dos parâmetros adequados às rotinas de filtragem e interpolação, ilustrados na Figura 5.6, a manutenção da morfologia das curvas originais de pressão média e sua derivada, além da supressão dos componentes de natureza transitória presentes nesta curvas.

Já a Figura 5.10 apresenta resultados referentes ao tratamento das curvas de pressão e sua derivada, bem como sua análise no domínio da frequência. Deve-se mencionar a obtenção de curvas de pressão e derivada praticamente idênticas às previstas pelos dados médios, após a aplicação do esquema proposto aos diagramas contaminados. A análise no domínio da frequência das curvas citadas acima, ainda na Figura 5.10, evidencia a eliminação de informações presentes em frequências associadas a fenômenos aleatórios, bem como a preservação de dados pertinentes a combustão pré-misturada. Os resultados apresentados na Figura 5.11 atestam a validade desta abordagem, destacando-se que praticamente não houve alteração da morfologia da curva de liberação de calor após sua contaminação seguida de tratamento numérico, obtendo-se assim adequada eliminação dos espúrios impostos por flutuações de pressão.

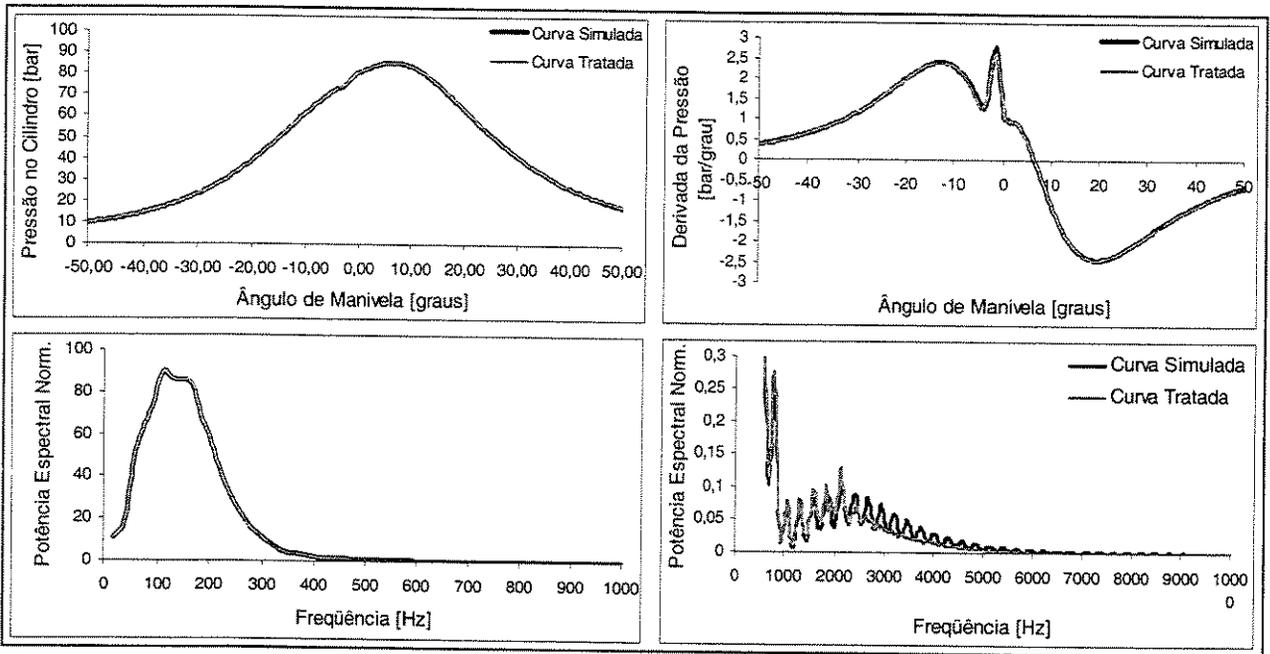


Figura 5.10: Resultados para o tratamento da pressão e sua derivada após contaminação.

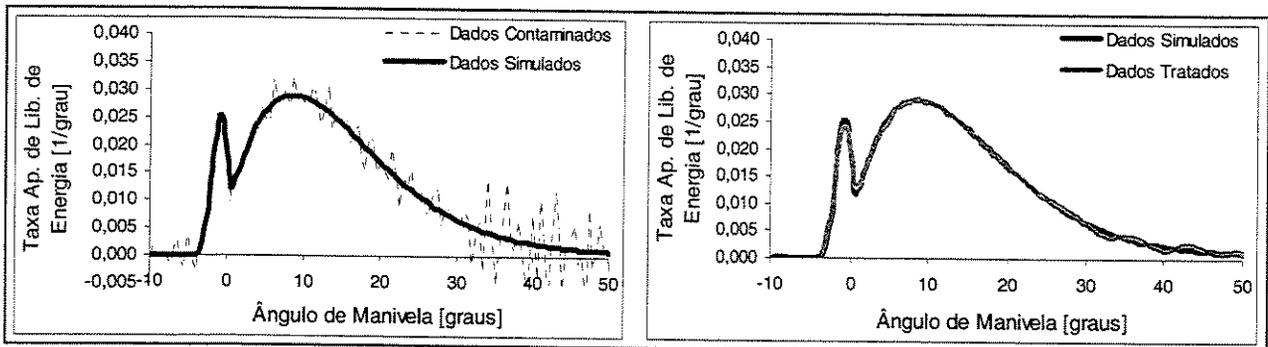


Figura 5.11: Resultado do tratamento da curva contaminada.

5.6 Conclusões quanto ao tratamento numérico dos dados de pressão

Algumas medidas como a obtenção de diagramas de pressão com valores médios entre diversos ciclos, a escolha criteriosa do local de instalação do sensor de pressão, a determinação dos diagramas de pressão após o motor ter alcançado regime permanente, além do tratamento numérico subsequente das curvas de pressão, podem assegurar a obtenção de valores adequados para os diagramas de pressão e sua derivada durante estudos de liberação de energia. Desta maneira, pode-se afirmar que a presença de oscilações nas curvas de liberação de energia está relacionada a não eliminação de elementos de natureza transitória nos dados experimentais de pressão no cilindro, sendo um fenômeno contornável mediante o tratamento numérico adequado destes dados.

De maneira adversa ao estudo costumeiro dos componentes de natureza transitória presentes nos diagramas de pressão, e de sua influência sob o ruído emitido por motores diesel [78, 82, 83, 84], o presente trabalho focou-se na análise da derivada da pressão em relação ao ângulo de manivela. Baseando-se no pronunciado efeito dos componentes de natureza transitória sob a morfologia dos diagramas de derivada da pressão, no domínio do tempo e da frequência. Assim, preterindo-se o estudo dos diagramas de pressão em favor de sua derivada, facilitou-se a identificação de componentes transitórios nestes diagramas, além de sua posterior eliminação.

Sob esta ótica, e levando-se em conta a ausência de explanações detalhadas sobre uma abordagem eficaz nesta área, algumas considerações relativamente simples e eficazes para o acondicionamento dos dados de pressão provenientes de ensaios dinamométricos foram apresentadas neste capítulo. Estas exposições apóiam-se nos resultados obtidos durante o tratamento de dados experimentais provenientes de ensaios em bancada, bem como simulações computacionais de motores diesel. Devido às características generalistas dos algoritmos apresentados, pode-se utilizar o procedimento proposto neste trabalho para o condicionamento de dados provenientes de ensaios realizados em outros motores, em qualquer regime de operação.

CAPÍTULO 6

A Combustão das Misturas entre Óleo Diesel e Ésteres Etílicos do Óleo de Soja

Os ésteres de álcoois, que recebem a denominação genérica de biodiesel, constituem uma promissora fonte renovável para a obtenção de combustíveis capazes de substituir o óleo diesel [2, 3, 4, 5, 6, 7]. Estas substâncias possuem alto conteúdo energético, são livres de enxofre em sua composição química, não geram substâncias danosas ao meio ambiente durante sua produção, sendo ainda obtidas por culturas vegetais que consomem dióxido de carbono da atmosfera através da fotossíntese [87]. Na Europa, bem como nos Estados Unidos da América, é comum a utilização de metanol para a produção do biodiesel, devido à sua maior disponibilidade frente ao etanol nestes mercados. Desta maneira, encontram-se disponíveis na literatura estudos sobre a queima, em motores de ciclo diesel, de misturas entre o metil-éster de soja e o óleo diesel convencional [88, 89].

No Brasil, a grande disponibilidade de etanol e óleo de soja torna atraente sua combinação na produção de ésteres de óleos vegetais, com o propósito de se substituir parcialmente o óleo diesel [87]. Esta disponibilidade, a ausência de estudos detalhados de liberação de energia em motores operando com ésteres etílicos, bem como o distanciamento entre as propriedades físico-químicas do biodiesel obtido a partir do metanol e do etanol, motivaram a realização da análise de liberação de energia apresentada neste capítulo.

Utilizou-se para tal estudo um motor diesel MWM 6.07T GMT400, de injeção direta, de quatro tempos, seis cilindros e turbo-alimentado. O motor foi submetido a ensaios em dinamômetro, obtendo-se dados de referência a partir da operação com óleo diesel N° 2. Com o intuito de se verificar a queima das misturas entre óleo diesel e biodiesel (ésteres etílicos de óleo de soja), empregou-se uma mistura contendo 20% de biodiesel em volume, sem que se realizasse qualquer modificação no motor ensaiado. Esta proporção foi utilizada por constituir um valor típico durante a realização de estudos com os ésteres metílicos de soja [87].

Os diagramas experimentais de pressão obtidos durante estes ensaios foram levantados através da utilização de um transdutor piezoelétrico AVL GMD-12, alimentando o sistema de aquisição de dados AVL IndyMeter 617.

6.1 Propriedades do etil-éster de soja e outros combustíveis

As propriedades físico-químicas apresentadas pelo biodiesel obtido a partir do etanol possuem considerável distanciamento das relatadas mediante a utilização do metanol, conforme se observa na Tabela 6.1. Destacando-se, sob este aspecto, o acréscimo em cerca de 25% para a viscosidade do éster etílico de soja, frente ao biodiesel obtido a partir do metanol. Estendendo-se tal comparação ao óleo diesel convencional, pode-se apreciar uma discordância ainda maior para a viscosidade.

Combustível	PCI (kJ/kg)	Densidade Específica	Viscosidade (x 10 ² m ² /s @ 40°)	Número de Cetanas (ASTM D-613)
Óleo Diesel N° 2	43319,36	0,85000	2,60	45,00
80% Óleo Diesel N° 2 + 20 %Etil-Éster de Soja	42094,15	0,85620	3,05 (estimada)	46,3
80% Óleo Diesel N° 2 + 20 %Metil-Éster de Soja	42000,00	0,85705	2,82	47,3
Metil-Éster de Soja	37184,00	0,88530	4,08	50,9
Etil-Éster de Soja	37193,30	0,88100	4,41	48,2

Tabela 6.1: Propriedades do diesel, ésteres metílico e etílico de soja e misturas de interesse [7, 89].

De acordo com a norma ASTM D-445, o valor máximo da viscosidade a 40°C de um combustível para motores diesel é de $4,1 \cdot 10^{-2} \text{ m}^2/\text{s}$. Para que esta norma seja atendida, o acréscimo de éster etílico de soja ao diesel convencional não deverá superar a marca de 70% em volume. A influencia desta propriedade sob a dinâmica do jato combustível, além de sua mistura com o ar durante a operação do motor, irá proporcionar ligeiras alterações no processo de queima em estudo, conforme se verificará adiante. Alterações na densidade, conteúdo energético, número de cetanas e composição química do combustível em estudo, efetuadas mediante a adição do etil-éster de soja ao óleo diesel, também acarretarão modificações passíveis de análise no processo de queima deste combustível.

Número de Átomos na Molécula de Combustível	Óleo Diesel N° 2	80% Diesel + 20% Etil-Éster de soja	Etil-Éster de soja
Átomos de Carbono (C)	14,4	15,16786	19,75484
Átomos de Hidrogênio (H)	24,9	26,57629	36,59001
Átomos de Oxigênio (O)	0	0,287007	2,001512
Átomos de Enxofre (S)	< 0,032	< 0,0256	0,00

Tabela 6.2: Fórmulas empíricas dos combustíveis em estudo.

6.2 Análise de liberação de energia

As Figuras 6.1, 6.2 e 6.3 ilustram os resultados obtidos através da aplicação da análise de liberação de energia ao motor MWM 6.07T GMT400 sob três regimes de operação, utilizando-se o óleo diesel N° 2 como combustível de referência (B00), além da mistura a 20% em volume entre este combustível e o etil-éster de soja (B20). Podem ser observadas nestas figuras as curvas de liberação de energia (normalizadas), o comportamento da temperatura média do fluido de trabalho e o histórico da massa de combustível no interior do cilindro.

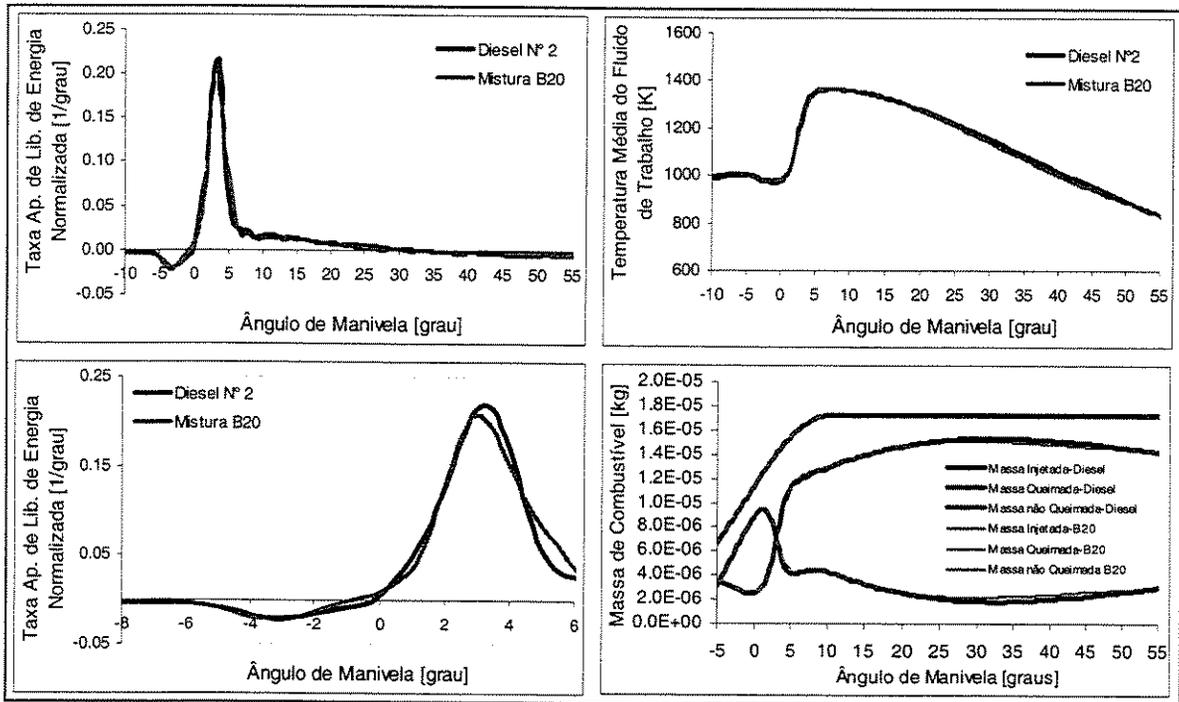


Figura 6.1: Diagramas para operação em baixa carga (40% de carga a 1400 rpm).

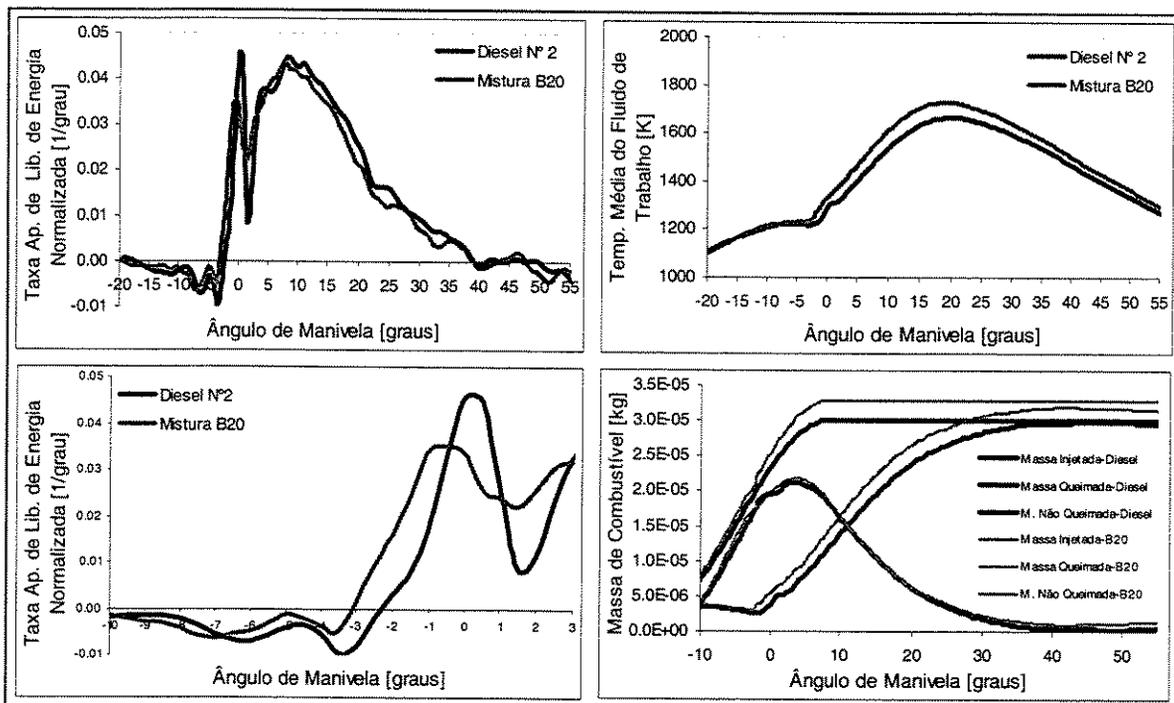


Figura 6.2: Diagramas para operação em carga mediana (60% de carga a 2600 rpm).

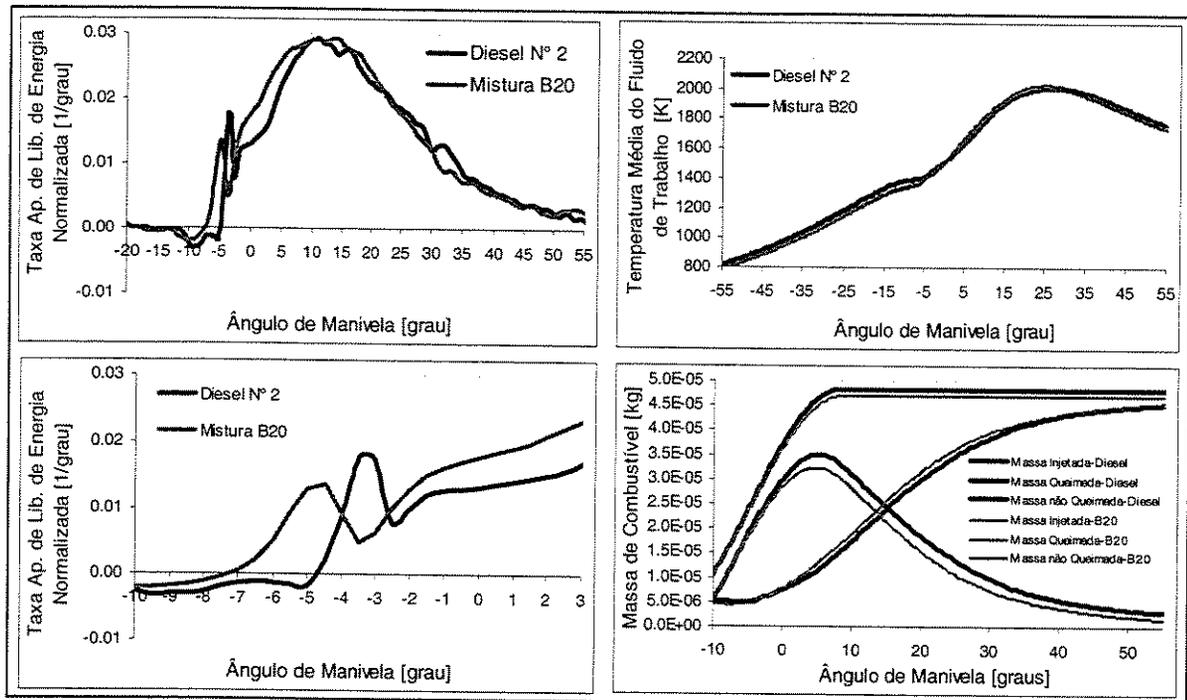


Figura 6.3: Diagramas para operação em plena carga (100% de carga a 3200 rpm).

Sabe-se que a adição de biodiesel ao óleo diesel aumenta o número de cetanas do combustível, ver Tabela 6.1, o que por sua vez diminui o tempo necessário para o início da combustão [90]. Na tabela 6.3, bem como nas Figuras 6.1, 6.2 e 6.3, pode-se observar a redução do atraso de ignição, mediante a utilização da mistura B20, frente a operação com diesel. Observa-se ainda que esta tendência é acentuada a medida que se aumenta a carga a que o motor é submetido, e portanto a quantidade de mistura a ser preparada.

Esta redução do período de atraso da ignição terá implicações nas etapas subsequentes da combustão da mistura B20, pois ela levará à diminuição da quantidade de mistura preparada até o momento da ignição. Desta maneira haverá menor quantidade de mistura combustível disponível para a queima pré-misturada, nos momentos imediatamente subsequentes a ignição. Justifica-se assim a diminuição do pico de liberação de energia característico da combustão pré-misturada, observada no caso do funcionamento do motor com a mistura B20, frente a utilização de diesel.

Outro fator que tem importante influência sobre o processo de combustão é o aumento da viscosidade do combustível B20 com relação ao óleo diesel. Chang e co-autores [41] observaram que a utilização de combustíveis de maior viscosidade provoca um aumento na velocidade de penetração do jato combustível. Espera-se que isto, por sua vez, aumente a taxa de misturação e de preparação da mistura combustível. Uma vez que esta taxa controla a liberação de calor na

fase difusiva da combustão [17], espera-se que ocorra um aumento da liberação de calor nessa fase, frente aos valores reportados para a combustão pré-misturada, mediante a adição de ésteres etílicos de soja ao combustível base. Observando-se os diagramas de liberação de energia apresentados nas Figuras 6.1, 6.2 e 6.3, pode-se identificar este aumento.

Ainda nestas figuras, pode-se observar que no início da fase difusiva da combustão a queima da mistura B20 ocorre com maiores taxas de liberação de calor que as observadas no caso de operação com óleo diesel. Pode-se interpretar este fenômeno sob a forma de uma antecipação do ângulo de manivela a partir do qual o mecanismo de queima difusiva predomina sobre o de queima pré-misturada. Esta antecipação também está relacionada ao acréscimo da taxa de preparação da mistura combustível mencionado acima, que acaba por aumentar a taxa de queima difusiva durante o período em questão.

A fim de se quantificar o favorecimento ao mecanismo difusivo de combustão relatado para a mistura B20, frente ao detrimento da queima pré-misturada, as curvas de liberação de energia mostradas nas Figuras 6.1, 6.2 e 6.3 foram aproximadas por funções de Wiebe [21]. Deste modo pôde-se determinar os parâmetros que indicam a proporção de massa queimada sob cada mecanismo, χ_p para a combustão pré-misturada e χ_d para a difusiva, em cada diagrama de liberação de energia. A descrição completa dos resultados obtidos através desta interpolação pode ser encontrada no Apêndice A, e os parâmetros χ_p e χ_d para cada regime de operação estão indicados na Tabela 6.3. Estes parâmetros indicam uma redução de até 12% na massa de combustível queimada de modo pré-misturado, acompanhada do correspondente acréscimo no mecanismo difusivo.

	Regimes de Operação								
	40% de Carga a 1400 rpm			60% de Carga a 2600 rpm			100% de Carga a 3200 rpm		
Combustível	B00	B20	B20 x B100 (%)	B00	B20	B20 x B100 (%)	B00	B20	B20 x B100 (%)
Atraso da Ignição (graus)	5,000	4,900	-2,000%	13,500	13,300	-1,48%	6,000	4,000	-33,33%
X_p	0,335	0,315	-5,96%	0,098	0,095	-2,91%	0,028	0,024	-12,69%
X_d	0,665	0,685	3,00%	0,902	0,905	0,32%	0,972	0,976	0,36%

Tabela 6.3: Resultados obtidos para as proporções de massa queimada sob cada mecanismo.

A presença de cerca de 10% em massa de oxigênio na composição do etil-éster de soja, conforme se verifica na tabela 6.2, faz com que seu poder calorífico seja reduzido frente ao apresentado pelo óleo diesel convencional, como mostra a Tabela 6.1. Pode-se, desta maneira, acreditar que a adição de biodiesel ao combustível base irá reduzir a quantidade de energia liberada durante a operação do motor. Todavia a maior densidade do biodiesel, indicada pela Tabela 6.1, fará com que uma massa maior de combustível seja injetada mediante sua utilização.

Para as condições de operação verificadas no presente estudo, estes efeitos acabaram por equilibrar a quantidade de energia liberada mediante a utilização de óleo diesel convencional ou da mistura B20. Em situações de operação em baixa e plena carga, a utilização da mistura B20 veio a reduzir em cerca de 3% a energia liberada durante a combustão, frente aos dados indicados para o óleo diesel. Todavia, para cargas medianas, a liberação de energia acabou sendo acrescida em 3% mediante a utilização desta mistura combustível. Espera-se, portanto, uma pequena redução na performance do motor operando com a mistura B20 nos regimes de alta e baixa carga, acompanhada de um acréscimo em desempenho nas condições de cargas mediana, frente a utilização de óleo diesel.

Os dados relatados no parágrafo anterior podem ser verificados na Tabela 6.4, tendo sido obtidos a partir da associação da massa de combustível queimada, prevista pelo modelo de liberação de energia, ao conteúdo energético deste combustível.

Combustível	Regimes de Operação								
	40% de Carga a 1400 rpm			60% de Carga a 2600 rpm			100% de Carga a 3200 rpm		
	B00	B20	B20 x B00 (%)	B00	B20	B20 x B00 (%)	B00	B20	B20 x B00 (%)
Energia Liberada(J)	576,147	559,852	-2,828%	1221,606	1262,824	3,37%	1958,035	1894,237	-3,26%

Tabela 6.4: Energia liberada pela combustão determinada a partir da análise de liberação de energia.

6.3 Ensaios de desempenho

Realizaram-se ainda ensaios de desempenho e de análise do consumo de combustível, avaliando-se diretamente a influência do acréscimo de biodiesel ao diesel convencional sob a performance do motor utilizado neste trabalho. Os resultados obtidos nestes ensaios atestam a análise ilustrada pela Tabela 6.4, indicando a redução da performance do motor para condições de baixa carga e o acréscimo durante a operação com carga mediana, causado pelo emprego da

mistura B20. Infelizmente, não puderam ser obtidos dados suficientes para a construção dos gráficos de desempenho a plena carga, devido a capacidade inferior do dinamômetro com relação ao torque do motor.

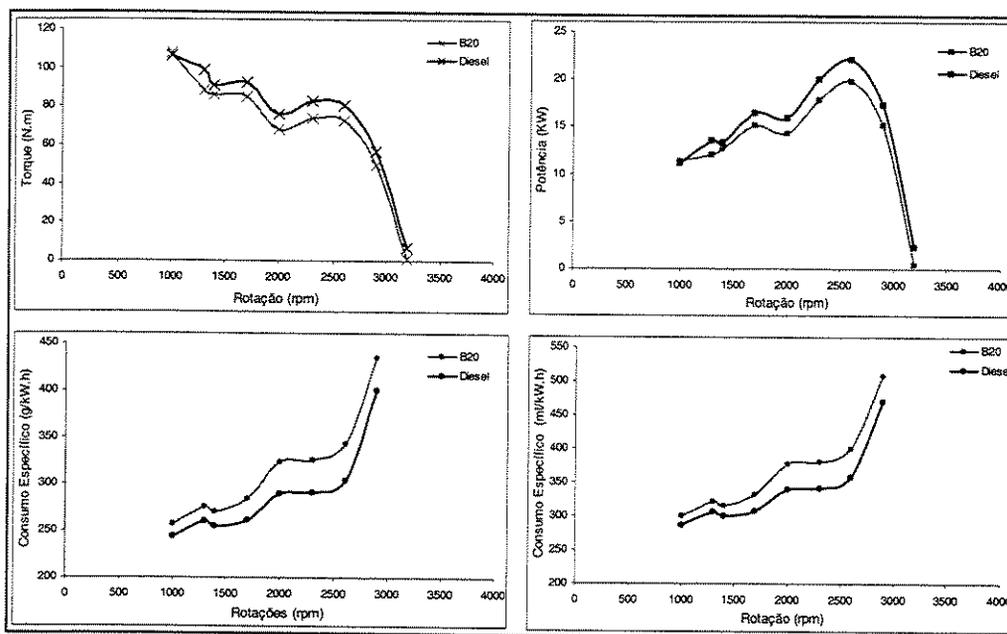


Figura 6.4: Resultados para o ensaio dinamométrico em condições de baixa carga (40%).

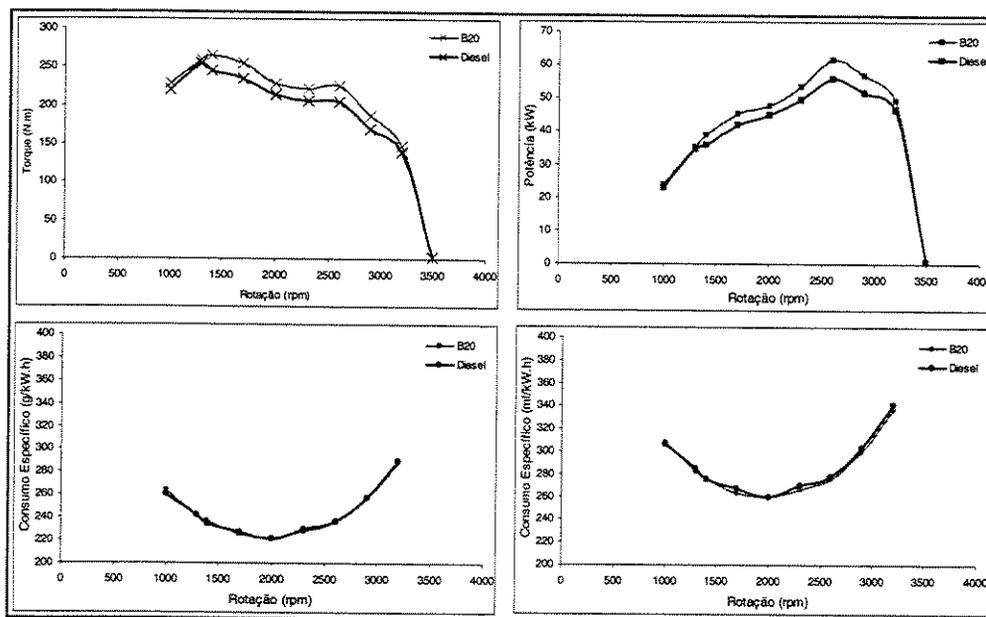


Figura 6.5: Resultados para o ensaio dinamométrico em condições de carga mediana (60%).

6.4 Emissões poluentes e a adição do etil-éster de soja

Através dos resultados indicados na Figuras 6.1, 6.2 e 6.3, observa-se que para as condições de operação analisadas a queima difusiva ocorreu a maiores temperaturas que a pré-misturada. Desta maneira o favorecimento ao mecanismo difusivo de combustão, relatado para a mistura B20, acresceu a queima de combustível a altas temperaturas, além de ter provocado um ligeiro aumento na temperatura média do fluido de trabalho para a operação em cargas parciais. Estes fatores favorecem claramente a formação de óxidos de nitrogênio (NO_x), através de seu mecanismo predominante em motores de combustão interna, o mecanismo térmico [48].

Assim espera-se que a utilização da mistura B20, a base de ésteres etílicos de soja, traga um acréscimo na emissão de óxidos de nitrogênio com relação a operação com óleo diesel convencional. Estas constatações assemelham-se com os resultados obtidos por Choi e Reitz [89] durante o estudo, através de simulações multidimensionais, dos efeitos da adição do metil-éster de soja ao diesel convencional. Através destas simulações, estes autores observaram um acréscimo da quantidade de carga a altas temperaturas mediante a adição de metil-éster de soja ao combustível base, que acabou por resultar em maior emissão de óxidos de nitrogênio. Todavia, os efeitos sob a liberação de energia da adição dos ésteres etílicos de soja mostraram-se consideravelmente superiores aos relatados para a adição de ésteres etílicos, devido ao valor consideravelmente maior do distanciamento em suas propriedades com relação ao diesel convencional.

Quanto à emissão de particulados, espera-se que a presença de oxigênio no combustível, acarretada pela adição de biodiesel ao combustível base, venha a diminuir a formação destes materiais. Além disto, a elevação de temperaturas durante a combustão difusiva, também causada pela adição de biodiesel, favorecerá a oxidação deste material. Desta maneira espera-se que a utilização da mistura B20 venha a reduzir consideravelmente a emissão de particulados, frente ao emprego do óleo diesel. Estas expectativas também são confirmadas na literatura, para a adição de ésteres metílicos de soja ao óleo diesel [89].

6.5 Conclusões quanto aos efeitos da adição do etil-éster de soja

Através da análise apresentada neste capítulo, pôde-se verificar a adequação da utilização da mistura B20, obtida a partir da adição do etil-éster de soja, em motores preparados para a operação com óleo diesel. As modificações no processo de queima ocasionadas pela adição do biodiesel, nas proporções estudadas neste documento, não comprometeram o adequado funcionamento do motor utilizado neste estudo. Por inibir a queima sob o mecanismo pré-misturado, espera-se ainda que a utilização da mistura B20 produza uma operação mais suave e com redução do ruído emitido pelo motor, frente ao emprego do diesel. Todavia, deve-se mencionar o esperado acréscimo nas emissões de óxidos de nitrogênio, como o principal ponto adverso à utilização da mistura B20 nos motores atualmente em operação.

A confiabilidade dos resultados proporcionados pelo estudo de liberação de energia apresentado neste trabalho pode ser atestada através da apreciação dos dados relatados na Tabela 6.5. A concordância entre os dados experimentais da relação de equivalência ϕ e os previstos pelo modelo de liberação de calor, além da proximidade entre os valores obtidos para a massa de combustível queimada frente a massa injetada, reiteram a qualidade dos diagramas de liberação de energia obtidos sob a metodologia descrita ao longo do presente documento.

Combustível	Regimes de Operação								
	40% de Carga a 1400 rpm			60% de Carga a 2600 rpm			100% de Carga a 3200 rpm		
	B00	B20	B20 x B00 (%)	B00	B20	B20 x B00 (%)	B00	B20	B20 x B00 (%)
ϕ Experimental	0,290	0,290	0,000%	0,399	0,423	6,07%	0,643	0,618	-3,92%
ϕ Modelo	0,270	0,270	0,000%	0,360	0,385	6,94%	0,622	0,602	-3,22%
Massa de Combustível Injetada (mg)	13,49	13,49	0,000%	28,21	30,98	9,85%	46,53	45,14	-2,99%
M. de Combustível Queimada (Modelo)	13,30	13,31	0,075%	28,20	30,00	6,38%	45,20	45,00	-0,44%

Tabela 6.5: Dados experimentais e fornecidos pelo modelo de liberação de energia.

CAPÍTULO 7

Conclusões

Neste trabalho, apresentou-se uma abordagem alternativa para a obtenção de diagramas de liberação de calor a partir de dados experimentais de pressão. O modelo sugerido foi capaz de prever, com apreciável exatidão, a massa total de combustível consumida durante o processo de combustão real. A abordagem proposta possibilita ainda a avaliação direta da presença de combustível não reagido no fluido de trabalho, e de sua influência sob as propriedades termodinâmicas da carga no cilindro.

Durante a aplicação deste modelo fez-se necessário o estudo do acondicionamento dos dados de pressão, provenientes de ensaios dinamométricos. Propôs-se, para este tratamento, a obtenção dos valores médios da pressão no cilindro, a partir da eliminação de suas componentes aleatórias através de técnicas numéricas de filtragem e interpolação. A suavidade dos resultados obtidos para os diagramas de liberação de energia, aliada a conservação da morfologia inicial dos dados experimentais de pressão, atesta a qualidade do tratamento proposto neste documento.

Também foram analisados os efeitos da adição de ésteres etílicos de soja ao óleo diesel Nº2, sobre o processo de combustão. Os resultados apresentados mostram que no caso da adição em 20% de biodiesel, em volume, reduziu-se o período de atraso da ignição e a queima pré-misturada. Houve ainda uma antecipação da predominância do mecanismo de queima difusiva sobre o de queima pré-misturada. Concluiu-se ainda que, sob as proporções estudadas, a adição de biodiesel não alterou significativamente o desempenho do motor testado.

Referências Bibliográficas

- [1] Benson, R. S., Whitehouse, N. D., Internal Combustion Engines, Pergamon Press, 1979.
- [2] Scholl, K. W., Sorenson, S. C., Combustion of Soybean Oil Methyl Ester in a Direct Injection Diesel Engine, SAE Paper 930934, 1993.
- [3] Nigro, F. E. B., Trielli, M. A., Determinação da Liberação de Calor Durante a Combustão de Ésteres de Óleos Vegetais em Motores, I Simpósio de Engenharia Automotiva, 1983.
- [4] Zhang, Y., Van Gerpen, J. H., Combustion Analysis of Esters of Soybean Oil in a Diesel Engine, SAE Paper 960765, 1996.
- [5] Christensen, M., Johansson, B., Einewall, P., Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Using Isooctane, Ethanol and Natural Gas – A Comparison With Spark Ignition Operation, SAE Paper 972874, 1997.
- [6] Nigro, F. E. B., The Effect of Cetane Improvers on the Rate of Heat Release in Diesel Engines Using Alcohols, VI International Symposium of Alcohol Fuel Technology, 1983.
- [7] Grabosky, M., S., McCormick, R., L., Combustion of Fat and Vegetable Oil Derived Fuels in Diesel Engines, Pog. Energy Combust. Sci., Vol. 24 pg 125-164, 1998.

- [8] Lyn, W. T., Valdamis, E., The application of High Speed Schlieren Photography to Diesel Combustion Research, Journal of Photograph Science, 1962.
- [9] Alcook, J. F., Scott, W. M., Some More Light on Diesel Combustion, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers: Automobile Division, Vol. 5 pg 179-200, 1962.
- [10] Wolfer, H. H., Der Zunderzug im Diesel Motor, CDE-Forschungsheft, Vol. 392 pg 15-24, 1938.
- [11] Lyn, W. T., Calculations of the Effect of Rate of Heat Release on the Shape of Cylinder Pressure Diagram and Efficiency, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers: Automobile Division, Vol. 1 pg 34-46, 1960-61.
- [12] Austen, A. E. W., 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, Vol. 1 pg 47-62, 1960-61.
- [13] Krieger, R. B., Borman, G. L., The Computation of Apparent Rate of Heat Release from Internal Combustion Engines, Paper 66-WA/DGP-4, ASME, 1966.
- [14] Ramos, J. I., Internal Combustion Engine Modeling, Hemisphere Publishing Corporation, New York, 1989.
- [15] Gatowski, J. A., Balles, E. N., Chun, K.M., Nelson, F.E., Ekchian, J.A., Heywood, J.B., Heat Release Analysis of Engine Pressure Data, SAE paper 841539, 1985.
- [16] Rakopoulos, C. D., Hountalas, D. T., Net and Gross Heat Release Rate Calculations in a DI Diesel Engine Using Various Heat Transfer Models, Transactions of ASME, Vol. 33, pg. 251-262, 1994.

- [17] Plee, S. L., Ahmad, T., Relative Rules of Premixed and Diffusion Burning in Diesel Combustion, SAE Paper 831733, 1983.
- [18] Li, H., Miller, D. L., Cernansky, N. P., SAE Paper 922328, 1992.
- [19] Hu, H., Keck, J. C., SAE Paper 872110, 1987.
- [20] Semenov, N. N., Reações em Cadeia, Goskhimtexitdat, 1934, Traduzido do Russo.
- [21] Wiebe, I. I., Recentes Avanços sobre os Ciclos de Trabalho em Motores, Mashizdat, 1962, Traduzido do Russo.
- [22] Watson, N., Pilley, A. D., Marzouk, M., A Combustion Correlation for Diesel Engine Simulation, SAE Paper 800029, 1980.
- [23] Miyamoto, N., Chikahisa, T., Murayama, T., Sawyer, R., Description and Analysis of Diesel Engine Rate of Combustion and Performance Using Wiebe Functions, SAE Paper 850107, 1985.
- [24] Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., Flannery, B. P., Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing, William H Press, 1996.
- [25] Velásquez, J. A., Simulação dos Processos e Análise Exergética dos Motores de Ciclo Diesel, Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas, 1992.
- [26] Whitehouse, N. D., Way, R. J. B., A Simple Method for the Calculation of Heat Release Rates in Diesel Engines Based on Fuel Injection Rate, SAE Paper 710134, 1971.
- [27] Kuo, T. W., YU, C. R., Shahed, S. M., A Numerical Study of the Transient Evaporating Spray Mixing Process in the Diesel Environment, SAE Paper 831735, 1983.

- [28] Kamimoto, T., Chang, Y. J., Kobayashi, H., Rate of Heat Release and Its Prediction of a Diesel Flame in a Rapid Compression Machine, SAE Paper 841076, 1984.
- [29] Hung, C.C., Martin, J.K., Koo, J., Injection Pressure Effects Upon Droplet Behavior in Transient Diesel Sprays, SAE Paper 970053, 1997.
- [30] Sinnamon, J. F., Lancaster, D. R., Steiner, J., An Experimental and Analytical Study of Engine Fuel Spray Trajectories, SAE Paper 8000135, 1980.
- [31] Kuo, T. W., Bracco, F. V., Computations of Drop Sizes in Pulsating Sprays and of Liquid Core Length in Vaporizing Sprays, SAE Paper 820123, 1982.
- [32] Shahed, S. M., Flynn, P. F., Lyn, W. T., A Model for the Formation of Emissions in a Direct Injection Diesel Engine, em Combustion Modeling of Reciprocating Engines, pg 345-368, Plenum Press, 1980.
- [33] Kobaiyashi, H., Kamimoto, T. Matsuoka, S., Prediction of Heat Release of an Axisymmetrical of a Diesel Flame in a Rapid Compression Machine, SAE Paper 840519, 1984.
- [34]. Annand, W. D, Heat Transfer in the Cylinders of Reciprocating Internal Combustion Engines, Proc. I. Mech. E., vol. 177, num. 36, 1963.
- [35] Woschni, G., A Universally Applicable Equation for the Instantaneous Heat Transfer Coefficient in the Internal Combustion Engine, SAE Paper 670931, 1967.
- [36] Bueno, A. V., Velásquez, J. A., Milanez, L. F., Condicionamento dos Dados de Pressão no Cilindro para o Cálculo da Taxa de Liberação de Calor Durante a Combustão em Motores Diesel, SAE Paper 2002013559.
- [37] W. H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling & B.P. Flannery, Numerical Recipes in C, Cambridge University Press, 1992.

- [38] Halstead, M., Kirsh, L., Quinn, C., The Autoignition of Hydrocarbon Fuels at High Temperatures and Pressures-Fitting a Mathematical Model, *Combustion and Flame*, vol. 30, pg. 45-60, 1977.
- [39] Cox, R. A., Cole, J. A., *Combustion and Flame*, vol. 60, pg. 109, 1985.
- [40] Griffiths, J. F., Reduced Kinetic Models and their Application to Practical Combustion Systems, *Progress on Energy and Combustion Science*, volume 21, pg. 25-107, 1995.
- [41] Hardenberg, H. O., Hase, F. W., An empirical Formula for Computing the Pressure Rise Delay of a Fuel from its Cetane Number and form Relevant Parameters of Direct-Injection Diesel Engines, SAE Paper 790493, 1979.
- [42] Westbrook, Dryer, Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion, *Progress on Energy and Combustion Science*, volume 10 pg 1-57, 1984.
- [43] Amsden, A. A., O'Rourke, P.J., Butler, T.D., KIVA-A Comprehensive Model for 2D and 3D Engine Simulations, SAE International Congress and Exposition, Detroit, Michigan, SAE Paper 850554, 1985.
- [44] Amsden, A. A., Butler, T.D., O'Rourke, P.J., The KIVA II Computer Program for Transient Multidimensional Chemically Reactive Flows with Sprays, SAE International Fuels and Lubricants Meeting and Exposition, Toronto, Ontario, SAE Paper 872072, 1987.
- [45] Amsden, A. A., KIVA III: A KIVA Program with Block Structured Mesh for Complex Geometries, Los Alamos report LA-12503-MS, 1993.
- [46] Mariani, F., Postrioti, L., Modeling Diesel Engine Using KIVA II 3D-Code: Validation of a New Global Combustion Model and its Sensitivity to the Spatial Discretization, SAE Paper 960872, 1996.

[47] Magnussem, B. F., Hjertager, B. H., An Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion, Sixteenth Symposium on Combustion, pg. 719, The Combustion Institute, 1976.

[48] Borman, G. L., Ragland, K. W., Combustion Engineering, McGraw-Hill International Editions, Singapura, 1998.

[49] Kong, S. C., Reitz, R. D., Multidimensional Modeling of Diesel Ignition and Combustion Using a Multistep Kinetics Model, ASME paper no. 93-ICE-22, J. Eng. Gas Turbines and Power, vol. 115, pg. 781-789, 1993.

[50] Adamson, B., Gosman, A.D., Marooney, C. J., Theodoropoulos, T., Jap. Society of Mechanical Engineers International Symposium, COMODIA 90, pg. 431, 1990.

[51] Hiraki, H., Rife, J. M., Performance and NO_x Model of a Direct Injection Stratified Charge Engine, SAE Paper 800050, 1980.

[52] Hiroyasu, H., Aray, M., Development and Use of a Spray Combustion Modeling to Predict Diesel Engine Efficiency and Pollutant Emissions, Proceedings of the Fifth International Automotive Propulsion Systems Simposium, pg 264-288, SAE,1980.

[53] Giannattasio, P., Micheli, D., Phenomenological Modeling of IDI Diesel Engines, SAE Paper 971592, 1997.

[54] Kouremenos, D. A., Rakopoulos, C. D., Hountalas, D. T., Multi-Zone Combustion Modeling for the prediction of Pollutants Emissions and Performance of DI Diesel Engines, SAE Paper 970635, 1997.

[55] Olikara, C., Borman, G. L., A Computer Program for Calculating Properties of Equilibrium Combustion Products with Some Applications to I.C. Engines, SAE Paper 750468, 1975. Este programa encontra-se disponível em www.engr.wisc.edu/centers/erc/per.

[56] Bueno, A. V., Velásquez, J. A., Rotinas de Elevadas Robustez e Precisão para o Cálculo da Composição em Equilíbrio dos Produtos de Combustão, ENCIT, 2001.

[57] Erickson, W. D., Prabhu, R. K., Rapid Computation of Chemical Equilibrium Composition: An Application to Hydrocarbon Combustion, AIChE Journal Vol. 32, pg. 1079-1087, 1986.

[58] Reynolds, W. C., The Element Potential Method for Chemical Equilibrium Analysis: Implementation of the Iterative Program STANJAN, Mechanical Engineering Dept., Stanford University, 1986.

[59] Gallo, W. R., Análise Exergética de Motores a Gasolina e a Álcool, Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas, 1990.

[60] Newhall, H. K., Kinetics of Engine Generated Nitrogen Oxides and Carbon Monoxide, XII Symposium on Combustion, The Combustion Institute, 1989.

[61] Spadiccini, L. J., Chinitz, W., An Investigation of Non-equilibrium Effects in an Internal Combustion Engine, ASME Paper No. 71-WA/FU2, 1972.

[62] Way, J.B., Methods for Determination of Composition and Thermodynamic Properties of Combustion Products for Internal Combustion Engine Calculations, Proc. Inst. Mech. Engrs., volume 190 pg 60-76, 1977.

[63] Li, H., Miller, D. L., Cernansky, N. P., , SAE Paper 922328, 1992.

[64] Willians, Combustion of Liquid Fuel Sprays, Butter Worths, 1990.

[65] Glassman, I., Combustion, Academic Press, New York, 3rd ed., 1997.

[66] O'Rourke, P. J., Amsden, A.A., Three Dimensional Numerical Simulation of the UPS-292 Stratified Charge Engine, SAE Paper 870597, 1987.

- [67] Flagan, R. C., Seinfeld, J. H., Fundamentals of Air Pollution Engineering, Prentice-Hall, 1988.
- [68] Monroe, A. J. E., Westlake, D., Lewis, A., J. Inst. E., pg. 10, 1978.
- [69] Harter, P., Acidic Deposition-Ecological Effects on Surface Waters, IEA Coal Research, 1989.
- [70] Squires, A., J. Inst. E., pg. 41, 1982.
- [71] Smith, J.M., Van Ness, H. C., Abbot, M. M., Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química, LTC Editora, 2000.
- [72] Morton, K. W., Mayers, D. F., Numerical Solution of Partial Differential Equations, Cambridge University Press, 1994.
- [73] Zacharias, F., Analytical Representation of the Thermodynamic Properties of Combustion Gases, SAE Paper 670930, 1967.
- [74] JANAF Thermo Chemical Tables, NSRDS-NBS, Third Edition, 1985.
- [75] Reitz, R. D., Bracco, F. V., Global Kinetics Models and Lack of Thermodynamic Equilibrium, Combustion and Flame, Vol. 53 pg. 141-143, 1983.
- [76] Timoney, D. J., Problems with Heat Release Analysis in D.I. Diesels, SAE paper 870270, 1987.
- [77] Homsy, S. C., Atreya, A., An Experimental Heat Release Rate Analysis of a Diesel Engine Operating under State Conditions, SAE paper 970889, 1997.
- [78] Priede, T, Relation Between form of Cylinder Pressure Diagram and Noise in Diesel Engines, Proc. Inst. Mech. Engrs., Vol. 1 pg. 63-77, 1961.

- [79] Pianovski, G. Jr., Utilização de Misturas de Óleo Diesel e Ésteres Etílicos de Óleo de Soja como Combustíveis Alternativos: Análise do Desempenho e do Processo de Combustão no Motor Diesel, Dissertação de Mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Paraná, 2001.
- [80] Witze, P. O., The Effect of Spark Location on Combustion in a Variable-Swirl Engine, SAE Paper 820044, 1982.
- [81] Lomb, N. R., Astrophysics and Space Science, vol. 39, pg. 447-462, 1976.
- [82] Strahle, W. C., Handley, J. C., Varma, M. S., Cetane Rating and load Effects on Combustion Noise in Diesel Engines, Combustion Science and Technology, Vol. 17 pg. 51-61, 1977.
- [83] Strahle, W. C., Combustion Randomness and Diesel engine Noise: Theory and Initial Experiments, Combustion and Flame, Vol. 28 pg. 279-290, 1977.
- [84] Strahle, W. C., Muthukrishnan, M., Handley, J. C., Turbulent Combustion and Diesel Engine Noise, Sixteenth Symposium (International) on Combustion, pg. 337-346, The Combustion Institute, 1977.
- [85] Savitzky, A., Golay, M.J., Analytical Chemistry, vol. 36, pg. 1627-1639, 1964.
- [86] Biblioteca computacional IMSL.
- [87] Pianovski, G., Velásquez, J. A., “Perspectivas de Utilização no Brasil de Biodiesel como Substituto Parcial do Óleo Diesel”, 2002.
- [88] Choi, C. Y., Bower, G. R., Reitz, R. D., “Effects of Biodiesel Blended Fuels and Multiple Injections in D. I. Diesel Engines”, SAE Paper 970218, 1997.
- [89] Choi, C. Y., Reitz, R. D., “A Numerical Analysis of the Emissions Characteristics of Biodiesel Blended Fuels”, J. of Engineering for Gas Turbines and Power, Vol 121 pg. 31, 1999.
- [90] Shipinski, J., Uyehara, O. A., Meyers, P. S., “Experimental Correlation between Rate of Injection and Rate of Heat Release in a Diesel Engine”, Paper N° 68-DGP-11, ASME, 1968.
- [91] Chang, C., Farrel, P., “A Study on the Effects of Fuel Viscosity and Nozzle Geometry on High Injection Pressure Diesel Spray Characteristics”, SAE Paper 970353, 1997.

Apêndice A

A Aproximação dos Diagramas de Liberação de Energia

Serão apresentados a seguir os resultados para a interpolação das curvas de liberação de energia utilizadas no transcorrer do Capítulo 6. Os diagramas experimentais de liberação de energia, fornecidos pela aplicação do modelo de uma zona a dados de pressão no cilindro, foram aproximados por duas funções de Wiebe, como prevê a Equação 2.1. Empregou-se nesta tarefa o método dos mínimos quadrados, que originou as curvas correspondentes aos dados interpolados.

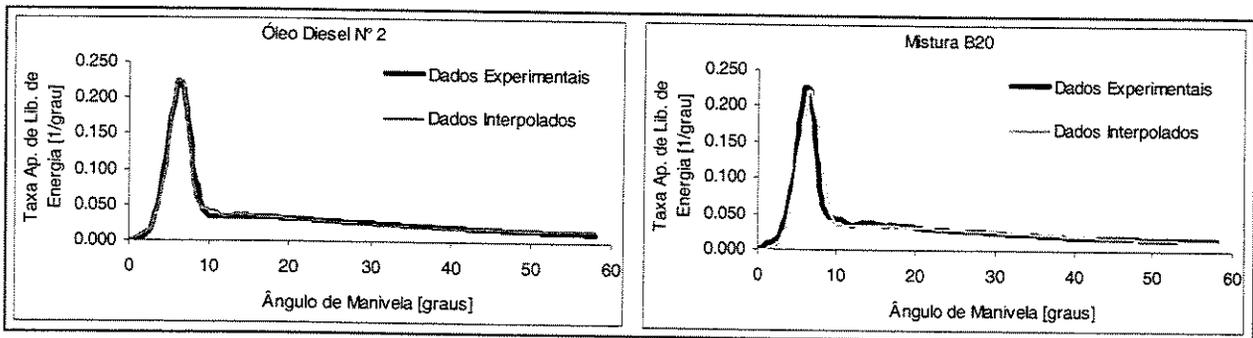


Figura A.1: Diagramas para operação em baixa carga (40% de carga a 1400 rpm).

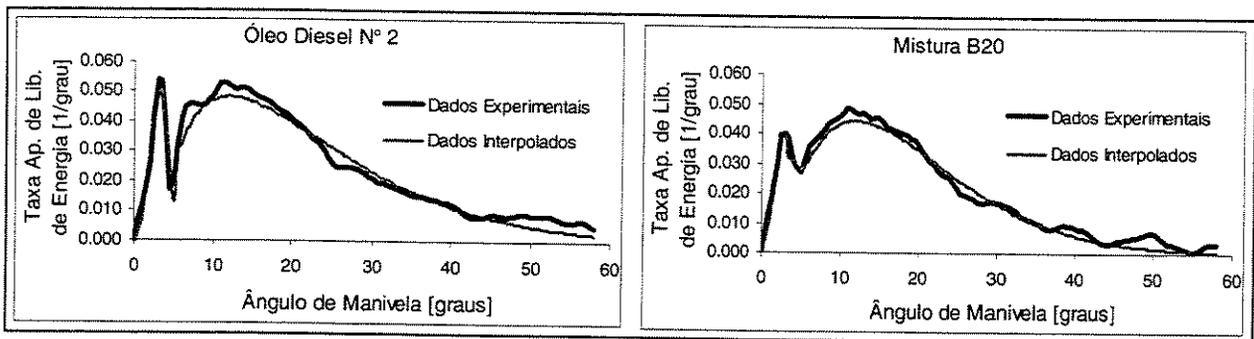


Figura A.2: Diagramas para operação em carga mediana (60% de carga a 2600 rpm).

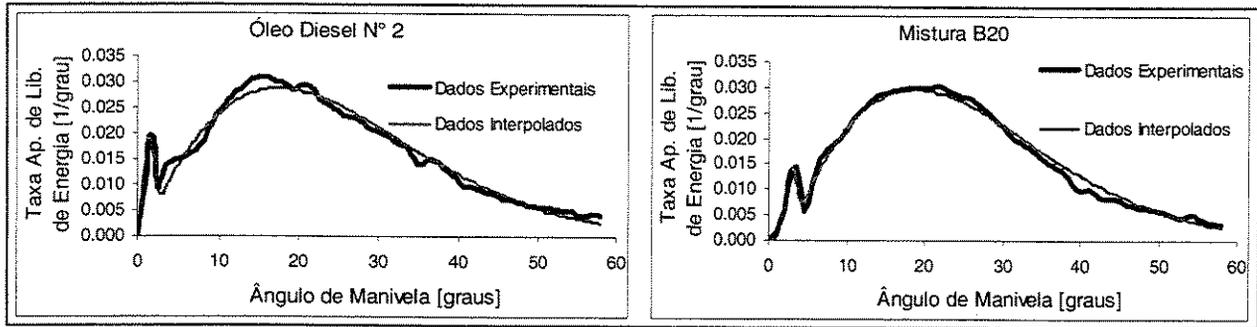


Figura A.3: Diagramas para operação em plena carga (100% de carga a 3200 rp