

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DE MINAS GERAIS
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

Tales Gonçalves Nazareno

**ANÁLISE NUMÉRICA DE UM MOTOR DIESEL OPERANDO NO CICLO OTTO
UTILIZANDO ETANOL SOBRE-HIDRATADO**

Belo Horizonte
2019

Tales Gonçalves Nazareno

**ANÁLISE NUMÉRICA DE UM MOTOR DIESEL OPERANDO NO CICLO OTTO
UTILIZANDO ETANOL SOBRE-HIDRATADO**

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

Orientador: Sérgio de Moraes Hanriot, D.Sc.

Área de Concentração: Sistemas térmicos e fluídos.

Belo Horizonte
2019

FICHA CATALOGRÁFICA

Elaborada pela Biblioteca da Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais

N335 Nazareno, Tales Gonçalves
Análise numérica de um motor diesel operando no ciclo otto utilizando etanol sobre-hidratado / Tales Gonçalves Nazareno. Belo Horizonte, 2019.
183 f.: il.

Orientador: Sérgio de Moraes Hanriot

Dissertação (Mestrado) – Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais.
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

1. Motores de combustão interna - Modelos matemáticos. 2. Motores de combustão interna - Simulação por computador. 3. Motor diesel. 4 Automóveis - Consumo de combustíveis. 5. Emissões de veículos. 6. Álcool como combustível. 7. Câmaras de combustão. I. Hanriot, Sérgio de Moraes. II Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.

CDU: 621.43

Tales Gonçalves Nazareno

**ANÁLISE NUMÉRICA DE UM MOTOR DIESEL OPERANDO NO CICLO OTTO COM
ETANOL SOBREHIDRATADO**

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

Área de Concentração: Sistemas térmicos e fluidos.

Prof. Sérgio de Moraes Hanriot, D. Sc. (orientador) - PUC Minas

Prof. Rogério Jorge Amorim, Ph.D. (examinador interno) - PUC Minas

Tadeu Cavalcante Cordeiro de Melo, D. Sc. (examinador externo) - Petrobras

Prof. Alex de Oliveira, D. Sc. (examinador externo) - UniBH

Belo Horizonte, 29 de março de 2019.

By contrast, the first fires flickering at a cave mouth are our own discovery, our own triumph, our grasp upon invisible chemical power. Fire contained, in that place of brutal darkness and leaping shadows, the crucible and the chemical retort, steam and industry. It contained the entire human future.

(Loren Eiseley - The Unexpected Universe)

AGRADECIMENTOS

À minha mãe, Maria, quem admiro muito, meus irmãos Alison, Rafael, Ana Carolina e meu pai pela educação moral;

À Lívia, Sara, Helani Camelo (s) e ao senhor José Luiz que me acompanharam todos os dias, nestes últimos anos, com todo o apoio e atenção possível;

Ao professor e orientador Sérgio Hanriot pela paciência, os ensinamentos para realização desse trabalho;

À professora Cristiana Brasil pelo aprendizado e pelo direcionamento;

Ao professor Rogério Amorim pelos ensinamentos, paciência, uma referência para a realização do estudo;

Ao Ivair, Davidson e Felipe pelo auxílio diante às frequentes dúvidas;

Vinícius e o Marco Aurélio que participaram desde o início deste trabalho;

Alex e ao Osmano, pelos ensinamentos;

A Valéria Gomes, primeira pessoa que conheci no PPGEM, que trabalha com a dedicação de alguém que o que faz, faz bem feito; recebe todos com muita atenção e profissionalismo, muito grato pela assistência no processo inicial de ingresso e durante o programa;

À PUC Minas pela disponibilização dos recursos materiais e humanos;

A todos os professores, mestres e amigos do PPGEM;

Ao CECAC, cuja bolsa permitiu essa atividade de pesquisa;

Por fim, não menos importante, agradeço a Deus pela inspiração, sabedoria, perseverança e a Senhora da Piedade, padroeira de todos os mineiros; que no alto da Serra da Piedade, magnífica arquitetura divina, herança nossa que vamos sempre preservar e defender, pusestes vossa casa de clemência e bondade, Santuário Estadual de Minas Gerais.

RESUMO

O presente trabalho investigou, através de análise numérica, a substituição de um combustível fóssil na operação de um motor a combustão interna do ciclo Diesel, convertido para a operação com etanol sobre-hidratado e um programa computacional de simulação foi utilizado para caracterizar o comportamento do motor. A partir dos resultados dos parâmetros de emissões e desempenho foi possível determinar a melhor condição de operação, variando-se o índice de hidratação e a razão volumétrica de compressão. Os testes foram realizados com hidratações de 10%, 20%, 30% e 40% (v/v) adicionadas ao etanol hidratado comercial (7%) e simulações de operação com razões volumétricas de compressão de 17:1 a 22:1. O modelo numérico foi validado com base em dados experimentais, onde observou-se uma diferença média de 6% entre os resultados. Comparando-se as curvas de pressão simulada e experimental obteve-se variação máxima de 2,3% nos picos de pressão. Com a variação da razão volumétrica de compressão o ganho na eficiência global foi de 3% para a carga de 35 kW e as melhores condições observadas foram em plena carga para o etanol sobre-hidratado em 17% (EHC17) e 27% (EHC27) na razão volumétrica de compressão de 22:1. Não houve ocorrência de detonação na condição mencionada anteriormente e a plena carga foi identificado um ganho de eficiência de 11,30% atingindo a potência de 62,5 kW e torque de 332,5 N.m. Em relação às emissões alcançou-se redução de 24% de CO na razão volumétrica de compressão de 22:1 quando comparado com os dados experimentais para carga de 35 kW e razão volumétrica de compressão de 17:1.

Palavras-chave: Análise Numérica. Motor a Combustão Interna. Etanol Sobre-hidratado. Razão Volumétrica de Compressão. Eficiência. Emissões

ABSTRACT

The present study was aimed to investigate, through a numerical analysis, a fossil fuel substitution on an internal combustion engine, Diesel cycle, converted to a wet ethanol operation throughout a computer simulation program used to characterize its behavior. From the performance parameters results it was possible to determine the best operating condition varying the inside wet ethanol water amount and the compression ratio. The tests were performed with 10%, 20%, 30% and 40% (v/v) water percentage added to commercial hydrated ethanol (7%) and simulations with compression ratios from 17: 1 to 22: 1 were done. The numerical analysis was validated based on experimental data, where an average difference of 6% in the results was achieved. At the maximum peak pressure inside the cylinder the variation of 2.3% was reached between simulated and experimental results. With higher compression ratios, the efficiency gain was 3% for 35 kW load. The best conditions observed were at wide open throttle with 17% (EHC17) and 27% (EHC27) wet ethanol usage and 22:1 compression ratio. There was no knock occurrence in the condition mentioned above and 11,30% of efficiency was achieved with peaks of 62.5 kW and 332.5 Nm. Regarding to the emissions reduction, 24% of CO was attained at the 22:1 compression ratio when compared to 35 kW load and 17: 1 compression ratio experimental data.

Keywords: Numerical Analysis. Internal Combustion Engines. Wet Ethanol. Compression Ratio. Efficiency. Emissions.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 - Evolução do mercado de veículos novos	46
FIGURA 2 - Emissões de CO ₂ por tecnologia (gCO ₂ /km)	47
FIGURA 3 - Evolução do consumo energético (MJ/km) por emissão (gCO ₂ /km).....	48
FIGURA 4 - Trabalhos realizados pelo CPMEC.....	72
FIGURA 5 - Ciclo Otto Ideal	74
FIGURA 6 - Eficiência térmica do Ciclo Otto Ideal x razão volumétrica compressão	75
FIGURA 7 - Ciclo Otto Ideal X Real	76
FIGURA 8 - Ciclo Ideal Diesel.....	77
FIGURA 9 - Eficiência térmica do Ciclo Diesel Ideal x razão volumétrica de compressão.....	78
FIGURA 10 - Representação da variação do volume em um cilindro	79
FIGURA 11 - Medição de Torque.....	80
FIGURA 12 - Variação da Pressão no cilindro por volume	82
FIGURA 13 - Processo de produção de açúcar, etanol e diesel de etanol	87
FIGURA 14 - Diferença na composição da gasolina e do etanol	89
FIGURA 15 - Utilização de energia no processo de produção do etanol	91
FIGURA 16 - Relação do poder calorífico pelo índice de hidratação	92
FIGURA 17 - Modelos de análise numérica	97
FIGURA 18 - Taxa de liberação de calor ROHR	100
FIGURA 19 - Balanço de energia no cilindro.....	101
FIGURA 20 - Diâmetro interno da sede da válvula	104
FIGURA 21 - Coeficiente de perdas por atrito na curva do duto	109
FIGURA 22 - Parâmetros de curvatura do duto	109
FIGURA 23 - Desenvolvimento da frente de chama em motores SI	113
FIGURA 24 - Região de autoignição na câmara de combustão	116
FIGURA 25 - Esquema original do grupo Motor-Gerador no ciclo Diesel	128
FIGURA 26 - Esquema do grupo Motor-Gerador adaptado para operar no ciclo Otto com etanol sobre-hidratado.....	129
FIGURA 27 - Modelo numérico do motor MWM 229/4 convertido para o ciclo Otto	131
FIGURA 28 - Dutos de exaustão e admissão do grupo Motor-Gerador	133
FIGURA 29 - Dutos de admissão e exaustão do modelo numérico	133

FIGURA 30 - Fluxograma do trabalho de simulação para o motor mwm 229/4.....	141
FIGURA 31 - Fluxograma da simulação no AVL <i>Burn</i>	143
FIGURA 32 - Plano de execução da simulação diagnóstica.....	144
FIGURA 33 - Fluxograma de validação do modelo numérico.....	145
FIGURA 34 - Gráfico da análise de convergência de CO e NOx.....	146
FIGURA 35 - Sequência de simulação do modelo no ciclo Otto, 1800rpm, 35kW variando a razão volumétrica de compressão	147
FIGURA 36 - Vazão mássica de ar e de combustível 35 kW, 1800 rpm em função do índice de hidratação	156
FIGURA 37 - SFC e Eficiência global para carga de 35 kW 1800 rpm em função do índice de hidratação	157
FIGURA 38 - Comparação entre as curvas pressão experimental e simulada a1800rpm, 35kW, 17:1 para EHC, EHC17 e EHC27	157
FIGURA 39 - Comparação entre as curvas pressão experimental e simulada, 1800rpm, 35kW, 17:1 para EHC37 e EHC47	159
FIGURA 40 - Emissões experimentais e simuladas do modelo no ciclo Otto, em função do índice de hidratação 1800rpm, 35kW	161
FIGURA 41 - Consumo específico de combustível e eficiência global em função da razão volumétrica de compressão 1800rpm, 35kW, e a plena carga	163
FIGURA 42 - Trabalho realizado pelo cilindro em função da razão volumétrica de compressão, 1800rpm, 35 kW e a plena carga	164
FIGURA 43 - Variação da pressão interna do cilindro e da temperatura com a razão volumétrica de compressão, 1800rpm, 35 kW e a plena carga	164
FIGURA 44 - Variação do número de octanas requerido com a razão volumétrica de compressão a 1800rpm, 35 kW e a plena carga.	167
FIGURA 45 - Variação das emissões de CO com a razão volumétrica de compressão a 1800 rpm, 35 kW e a plena carga.....	168
FIGURA 46 - Variação das emissões de HC com a razão volumétrica de compressão a 1800 rpm, 35 kW e a plena carga.....	169
FIGURA 47 - Variação das emissões de NOx com a razão volumétrica de compressão a 1800 rpm, 35 kW e plena carga.....	170

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 - Concentração molar média de GEE, últimos 10 anos - 2017	42
TABELA 2 - Resumo do estado da arte em relação ao consumo específico de combustível e eficiência térmica utilizando EHC e ESH.....	65
TABELA 3 - Resumo do estado da arte em relação as emissões de CO, HC, NO _x utilizando EHC e ESH	66
TABELA 4 - Propriedades do etanol combustível e do óleo diesel	85
TABELA 5 - Balanço energético da produção de etanol de diferentes culturas	88
TABELA 6 - Reações de formação de NO _x	118
TABELA 7 - Modelo de formação de CO	121
TABELA 8 - Misturas de etanol sobre-hidratado utilizadas	125
TABELA 9 - Dados do motor base	127
TABELA 10 - Componentes do grupo Motor-Gerador adaptado para operar no ciclo Otto	129
TABELA 11 - Dados experimentais de desempenho do Motor MWM 229/4 carga 35kW @1800rpm, operando no ciclo Otto com etanol sobre-hidratado	130
TABELA 12 - Dados experimentais de emissões do Motor MWM 229/4 carga 35kW @1800rpm, operando no ciclo Otto com etanol sobre-hidratado	130
TABELA 13 - Componentes do grupo Motor-Gerador.....	132
TABELA 14 - Relação dos dutos de admissão e exaustão	134
TABELA 15 - Representação das espécies de combustíveis	135
TABELA 16 - Definição das condições iniciais e contorno	136
TABELA 17 - Parâmetros da curva Vibe duas zonas para 17:1, 35kW e1800rpm..	137
TABELA 18 - Parâmetros do modelo de detonação para 35kW e1800rpm e razão volumétrica de compressão de 17:1.....	138
TABELA 19 - Parâmetros do modelo de formação de NO _x	139
TABELA 20 - Parâmetro do modelo de formação de CO	140
TABELA 21 - Parâmetro do modelo de formação de HC	141
TABELA 22 - Descrição das fases do plano de simulação	142
TABELA 23 - Fases do plano de simulação diagnóstica no AVL <i>Burn</i> para 1800rpm, 35kW e razão volumétrica de compressão 17:1.....	143
TABELA 24 - Descrição do procedimento de validação do modelo numérico	145

TABELA 25 - Plano de simulações para o trabalho proposto	147
TABELA 26 - Resultados da simulação no AVL Burn 200°C, 35kW a 1800rpm.....	150
TABELA 27 - Resultados da simulação no AVL Burn 300°C, 35kW a 1800rpm.....	151
TABELA 28 - Resultados da simulação no AVL Burn 400°C, 35kW a 1800rpm.....	152
TABELA 29 - Simulação do motor MWM229/4 no ciclo Diesel a1800rpm.....	154
TABELA 30 - Resultados dos parâmetros de desempenho experimentais e da simulação do modelo numérico no ciclo Otto, 17:1, 35kW a1800rpm	155
TABELA 31 - Diferença entre picos de pressão experimental e simulados do modelo numérico no ciclo Otto, 17:1, 35kW a1 800rpm	160
TABELA 32 - Resultados de emissões experimentais e da simulação de modelo numérico no ciclo Otto, 17:1, 35kW a 1800rpm	160

LISTA DE ABREVIATURAS

A/F	Razão Ar Combustível
A/F _s	Razão Ar Combustível Estequiométrica
ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
AEA	Agência Brasileira de Engenharia Automotiva
ANP	Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis
APMS	Antes do Ponto Morto Superior
ASTM	<i>American Society for Testing and Materials</i>
AVL	<i>Anstalt für Verbrennungskraftmaschinen List</i>
B5	Óleo Diesel Combustível 5% de Biodiesel na Mistura
B7	Óleo Diesel Combustível 7% de Biodiesel na Mistura
B8	Óleo Diesel Combustível 8% de Biodiesel na Mistura
BAL	Balanço de Energia <i>AVL Burn</i>
BEV	<i>Battery Electric Vehicle</i>
BioQav	Bioquerosene de Aviação
BMEP	<i>Brake Mean Effective Pressure</i>
C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	Sacarose
C ₂ H ₆ O	Etanol
C ₆ H ₁₂ O ₆	Glicose
CAD	Ângulo do Eixo do Virabrequim
CADC	<i>Commom Artemis Driving Cycle</i>
CaO	Óxido de Cálcio
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CH ₃ CH ₂ OH	Etanol
CH ₃ CHO	Acetaldeído
CI	Ignição por Compressão
CO	Gás Carbônico
CO ₂	Dióxido de Carbono
COP21	Conferência das Partes 21 (Paris)
CPMEC	Centro de Pesquisa em Motores, Emissões e Combustíveis

CSV	<i>Comma Separated Values</i>
D	Diâmetro
DI	<i>Direct Injection</i>
DPMS	Depois do Ponto Morto Superior
E5	5% de Etanol v/v em Gasolina
E60W40	60% de Etanol e 40% Água v/v
E70W30	70% de Etanol e 30% Água v/v
E75	75% de Etanol v/v em Gasolina
E80W20	80% de Etanol e 20% Água v/v
E85	85% de Etanol v/v em Gasolina
E90W10	90% de Etanol e 10% Água v/v
EAC	Etanol Anidro Combustível
EDI	<i>Ethanol Direct Injection</i>
EES	<i>Engineering Equation Solver</i>
EGR	<i>Exhaust Gas Recirculation</i>
EHC	Etanol Hidratado Combustível
EHC10	83% de Etanol e 17% de água
EHC20	73% de Etanol e 27% de água
EHC30	63% de Etanol e 37% de água
EHC40	53% de Etanol e 47% de água
EPA	<i>United States Environmental Protection Agency</i>
ESH	Etanol Sobre/Super Hidratado
EVO	<i>Exhaust Valve Open</i>
F/A	Razão Combustível Ar
F/As	Razão Combustível Ar Estequiométrica
FCHEV	<i>Fuel Cell Hybrid Electric Vehicle</i>
FDM	<i>Finite Difference Method</i>
FFV	<i>Fuel Flex Vehicles</i>
FMEP	<i>Friction Mean Effective Pressure</i>
FTP-75	Percurso Médio Via Pública e Partida a Frio em Dinamômetro
FVM	<i>Finite Volume Method</i>

GCI	<i>Gasoline Compression Ignition</i>
GDI	<i>Gasoline Direct Injection</i>
GEE	Gases de Efeito Estufa
GLP	Gás Liquefeito de Petróleo
GMV	Gás Metano Veicular
GNV	Gás Natural Veicular
HC	Hidrocarbonetos
HCCI	<i>Homogeneous Charge Compression Ignition</i>
HCHO	Formaldeído
I	Injetor
IAD	Índice Antidetonante
ICE	<i>Internal Combustion Engine</i>
IEA	<i>International Energy Agency</i>
IMEP	<i>Indicated Mean Effective Pressure</i> - Pressão Média Indicada
IPCC	<i>The Intergovernmental Panel on Climate Change</i>
IVC	<i>Intake Valve Close</i>
J	Junções
LSM	Mínimos Quadrados de Monte Carlo
MFB	Fração de combustível queimado
MFB	Ponto de máximo torque
MON	<i>Motor Octane Number</i>
MP	Pontos de Medição
N ₂	Nitrogênio
NASI	<i>Naturally Aspirated Spark Ignited</i>
NEDC	<i>New European Driving Cycle</i>
NEF	<i>Net Energy Factor</i>
NIMEP	<i>Net Indicated Mean Effective Pressure</i>
NO	Óxido Nítrico
NO ₂	Dióxido de Nitrogênio
NO _x	Óxido de Nitrogênio
ON	Número de Octanas

ONU	Organização das Nações Unidas
PC	Poder Calorífico
PCI	Poder Calorífico Inferior
PCS	Poder Calorífico Superior
PFI	<i>Port Fuel Injection</i>
PHEV	<i>Plug-in Hybrid Electric Vehicle</i>
PL	<i>Plenum</i>
PM	Material Particulado
PMI	Ponto Morto Inferior
PMS	Ponto Morto Superior
PNAS	<i>Proceedings of the National Academy of Sciences</i>
PPB	Partícula Por Bilhão
PPC	<i>Partially Premixed Combustion</i>
PPM	Partícula Por Milhão
R	Redução de Seção
RCV	Razão de Compressão Volumétrica
ROHR	Taxa de Liberação de Calor
RON	<i>Research Octane Number</i>
RPM	Revoluções Por Minuto
SAE	<i>Society of Automotive Engineers</i>
SB	Condições de Contorno
SCORE	<i>Single Cylinder Optical Research Engine</i>
SEEG	Sistema de Estimativas de Emissões e Remoções de Gases de Efeito Estufa
SFC	Consumo Específico de Combustível
SI	Ignição por Centelha
SOC	Início da Combustão
TCSI	<i>Turbocharged Spark Ignited</i>
WMO	<i>World Meteorological Organization</i>

LISTA DE SIGLAS

k	Coeficiente Politrópico [adimensional]
\dot{m}_a	Vazão Mássica de Ar [Kg/h]
\dot{m}_f	Vazão Mássica de Combustível [Kg/h]
$\sum \frac{dQ_W}{d\theta}$	Taxas de Calor Transferido Através das Paredes [kW]
$\sum \frac{dm_e}{d\theta} \cdot h_e$	Somatório do Fluxo de Entalpia pela Válvula de Exaustão [kJ/kg]
$\sum \frac{dm_i}{d\theta} \cdot h_i$	Somatório do Fluxo de Entalpia pela Válvula de Admissão [kJ/kg]
$\frac{dm_i}{d\theta}_c$	Taxa de Variação de Massa de Entrada [kg/°CA]
$\dot{W}_{c,i}$	Taxa de Trabalho Líquido por Ciclo [kJ/h]
$\frac{dm_{BB}}{d\theta}$	Taxa de Variação de Massa pelo <i>blow-by</i> [kg/°CA]
$\frac{dm_c}{d\theta}$	Taxa de Variação de Massa [kg/°CA]
$\frac{dm_e}{d\theta}$	Taxa de Variação de Massa de Saída [kg/°CA]
$\frac{dm_{ev}}{d\theta}$	Taxa de Variação de Massa de Combustível Evaporado [kg/°CA]
$\frac{dQ_F}{d\theta}$	Taxa de Liberação de Calor [kW]
d_{hyd}	Diâmetro Hidráulico [m]
$\frac{dx}{d\theta}$	Taxa de Queima de Combustível [-]
$h_{BB} \cdot \frac{dm_{BB}}{d\theta}$	Fluxo de Entalpia Pelo <i>blow-by</i> [kJ/kg]
h_{fH_2O}	Entalpia Específica de Formação da Água [KJ/Kg]
A^*	Área Crítica [m ²]
A_{blowby}	Área Efetiva de escoamento pelas fendas do cilindro [m ²]
A_{eff}	Área Efetiva de Escoamento [m ²]
A_i	Área da Câmara de Combustão [m ²]
$C_{CO, equ}$	Concentração de CO [%]
$C_{CO, act}$	Concentração de CO [%]
$C_{NO, equ}$	Concentração de NO de Equilíbrio [%]
$C_{NO, act}$	Concentração de NO [%]

C_m	Velocidade Média do Pistão [m/s]
F_R	Força de Atrito [N]
H_j	Entalpia Específica por Substância [kJ/kg]
MM_H	Massa Molar do Hidrogênio [g/mol]
MM_{N_2}	Massa Molar do Nitrogênio [g/mol]
MM_{O_2}	Massa Molar do Oxigênio [g/mol]
MM_C	Massa Molar do Carbono [g/mol]
NO_{MULT}	Parâmetro de Formação de NO [adimensional]
NO_{POST}	Parâmetro de Formação e Degradação de NO [adimensional]
Q_p	Calor Transferido para Paredes do Cilindro [J]
S_j	Entropia Específica por Substância [kJ/kg.k]
T_0	Temperatura de Estagnação [K]
T_{UBZ}	Temperatura da Zona não Queimada [K]
T_c	Temperatura do Gás no Interior do Cilindro [K]
T_p	Temperatura nas Paredes do Cilindro [K]
T_{piston}	Temperatura Interna do Pistão [K].
V_B	Revoluções do Eixo Virabrequim por Ciclo [-]
V_b	Volume de Gases Queimados [m ³]
$V_{crevice}$	Volume Total de Cavidades [m ³]
V_d	Volume Deslocado [m ³]
V_u	Volume de Gases Não Queimados [m ³]
$W_{c,i}$	Trabalho Indicado por Ciclo [kJ]
$a_{1...5j}$	Coeficiente Polinomial por substância [adimensional]
a_b	Parâmetro de Eficiência de Combustão [adimensional]
cp_j	Calor Específico à Pressão Constante por Substância [kJ/kg.K]
$\frac{d(m_{c,u})}{d\theta}$	Taxa de Variação da Energia Interna [kW]
$\frac{dQ_F}{d\theta}$	Taxa de Calor Liberado pelo Combustível [kW]
$\frac{dm_v}{d\theta}$	Fluxo Mássico pela Válvula [kg/°CA]
d_{vi}	Diâmetro Interno da Sede da Válvula [m]
m_{H_2O}	Massa de Água Após a Queima [Kg]

m_c	Massa de Combustível [Kg]
$m_{crevice}$	Massa Alojada em Cavidades [Kg]
m_f	Massa de Combustível [kg]
n_H	Número de Moles de Hidrogênio [mol]
n_{N_2}	Número de Moles de Nitrogênio [mol]
n_{O_2}	Número de Moles de Oxigênio [mol]
n_c	Número de Moles de Carbono [mol]
p_0	Pressão de Estagnação [kPa]
p_{Ref}	Pressão de Referência [atm]
p_c	Pressão no Interior do Cilindro [Pa]
$p_c \cdot \frac{dV}{d\theta}$	Trabalho Realizado pelo Pistão [kJ]
$q_{ev} \cdot f \cdot \frac{dm_{ev}}{d\theta}$	Fluxo de Calor por Evaporação do Combustível [kJ]
q_w	Fluxo de Calor [W]
\dot{r}	Taxa de Reação [kmole/m ³ /s]
r_{CO}	Taxa de Formação e Degradação de CO [mol/cm ³ s]
$t_{85\%MBF}$	Tempo até 85% MBF (<i>Mass Fraction Burned</i>) [ms]
t_{knock}	Tempo Entre Início de Compressão e de Autoignição [ms]
t_{soc}	Início da Combustão [ms]
v_1	Volume do Cilindro [m ³]
v_2	Volume da Câmara de Combustão [m ³]
v_c	Volume da câmara de combustão [m ³]
v_d	Volume deslocado [m ³]
w_j	Fração Mássica de uma Substância na Fase Gasosa [-]
k_i	Taxa de Reação [mol/cm ³ s]
$k_{0,i}$	Constante de Taxa de Reação [mol/cm ³ s]
α_{ig}	Ângulo de Início de Combustão [°CA]
η_t	Eficiência Térmica [adimensional]
$\theta_{0\%MFB}$	Ângulo de 0% de MFB [°CA]
$\theta_{90\%MFB}$	Ângulo de 90% de MFB [°CA]
θ_{EVO}	Ângulo de Abertura da Válvula de Exaustão [°CA]
T	Torque [Nm]

V	Volume [m ³]
ζ	Coeficiente de Perda por atrito [adimensional]
λ	Razão de Equivalência Estequiométrica Ar/Combustível [-]
C	Concentração molar [kmole/m ³]
$r,$	Taxa de Reação [mol/cm ³ s]
A, B	Constantes do Modelo AVL [-]
$BMEP$	Pressão Média Efetiva [kPa]
CO_{POST}	Parâmetro de Produção e Degradação de CO. [mol/cm ³ s]
D	Diâmetro do Cilindro [m]
F	Força [N]
HC_{MULT}	Multiplicador de Mecanismo de Pós Oxidação [adimensional]
$HC_{PARTIAL}$	Parâmetro de Formação de Hidrocarbonetos [adimensional]
HC_{POST}	Fator de Escala para Mecanismo de Pós Oxidação [adimensional]
$IMEP$	Pressão Média Indicada [kPa]
M	Massa Molecular [kmol]
MW_j	Peso Molecular [kg/kmol]
ON	Número de Octanas [adimensional]
P	Potência [kW]
PC	Poder Calorífico [kJ/kg]
R	Constante Universal dos Gases [kJ/kmol.k]
R	Constante dos Gases [J/kg.K]
S	Entropia [kJ/(kg.K)]
T	Temperatura [K]
T_c	Temperatura Interna do Cilindro [K]
V	Volume [m ³]
V_c	Volume do Gás no Cilindro [m ³]
a	Número de Átomos de Carbono [kmol de combustível]
a, n	Constantes do Modelo AVL [-]
b	Número de Átomos de carbono [kmol de combustível]
c	Número de Átomos de carbono [kmol de combustível]
cd	Coeficiente de Fluxo [adimensional]
cv	Calor Específico a Volume Constante [J/kg/K]

d	Distância do Ponto de Aplicação [m]
i	Indexador [adimensional]
i	Índice de Reações Químicas Homogêneas [adimensional]
j	Índice de Espécies Químicas [adimensional]
m	Fator de forma da curva de liberação de calor [adimensional]
p	Pressão [atm]
p	Pressão [Pa]
sf_c	Consumo Específico de Combustível [g/kW.h]
u	Velocidade do fluido [m/s]
x	Fração de Combustível Queimado [adimensional]
A_i	Temperatura da Zona não Queimada [K]
T_{Ai}	Temperatura Equivalente de Reação [K]
a_i	Constante Equivalente de Reação [adimensional]
$\Delta\alpha_b$	Duração da Combustão [°CA]
α	Percentual em Base mássica de água [%]
δ	Abertura de <i>blow-by</i> [m]
π	Pi [-]
ρ	Densidade [kg/m ³]
τ	Atraso de Ignição [ms]
φ	Fator de Atrito de Fanning [adimensional]
ω	Rotação do Eixo Virabrequim [rev/s]
α	Relação [adimensional]
$q_{4,1}$	Fluxo de Energia Térmica da Exaustão [kJ]
$q_{2,3}$	Fluxo de Energia Térmica da Combustão [kJ]
$C2$	Valor padrão AVL <i>Boost</i> [adimensional]

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	41
1.1	Objetivos	44
1.2	Justificativa	45
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	49
2.1	Utilização de etanol combustível e a influência da razão volumétrica de compressão	49
2.1.1	<i>Estado da arte</i>	64
2.2	Trabalhos realizados no CPMEC	67
3	FUNDAMENTOS TEÓRICOS	73
3.1	Motores a combustão interna	73
3.1.1	<i>Ciclo Otto</i>	73
3.1.2	<i>Ciclo Diesel</i>	76
3.2	Parâmetros de desempenho	78
3.2.1	<i>Razão volumétrica de compressão</i>	78
3.2.2	<i>Torque</i>	79
3.2.3	<i>Potência</i>	80
3.2.4	<i>Pressão média indicada (IMEP)</i>	81
3.3	Combustíveis	83
3.3.1	<i>Biocombustíveis</i>	83
3.3.1.1	Etanol combustível	83
3.3.1.2	Etanol de segunda geração	90
3.3.1.3	Etanol sobre hidratado	91
3.3.2	<i>Poder calorífico</i>	92
3.3.3	<i>Razão ar combustível</i>	93
3.3.4	<i>Combustão estequiométrica</i>	94
3.3.5	<i>Consumo específico e eficiência Global</i>	96
3.4	Análise numérica	97
3.4.1	<i>AVL Boost</i>	99
3.4.2	<i>AVL Burn</i>	99
3.4.3	<i>Equação básica de conservação de energia no cilindro</i>	100
3.4.4	<i>Variação da massa no cilindro</i>	102
3.4.5	<i>Fluxo de massa pelas válvulas e blow-by</i>	102
3.4.6	<i>Escoamento unidimensional em dutos</i>	105
3.4.7	<i>Perda de carga em curvas nos dutos</i>	108
3.4.8	<i>Modelo de transferência de calor na câmara de combustão</i>	110
3.4.9	<i>Representação dos combustíveis</i>	111
3.4.10	<i>Modelos de Combustão</i>	112
3.4.11	<i>Modelo de detonação Knock Model</i>	115
3.5	Formação de poluentes	118
3.5.1	<i>Formação de óxidos de nitrogênio</i>	118
3.5.2	<i>Formação de Monóxido de Carbono</i>	120
3.5.3	<i>Formação de Hidrocarbonetos não queimados</i>	122

4	METODOLOGIA	125
4.1	Lista de materiais	126
4.2	O motor a combustão interna base	126
4.2.1	<i>O trabalho experimental</i>	127
4.2.2	<i>Os dados experimentais</i>	130
4.3	O modelo numérico e a parametrização	131
4.3.1	<i>Parametrização dos dutos de admissão e exaustão</i>	132
4.3.2	<i>Parâmetros dos combustíveis</i>	134
4.3.2.1	Injeção de combustível	135
4.3.3	<i>Parâmetros e condições de contorno</i>	135
4.3.4	<i>Parametrização do modelo de combustão</i>	136
4.3.5	<i>Parametrização do modelo de Knock</i>	137
4.3.6	<i>Parâmetros do modelo de transferência de calor</i>	138
4.3.7	<i>Parâmetros dos modelos de formação de poluentes</i>	139
4.3.7.1	Parâmetros do modelo de formação de NO_x	139
4.3.7.2	Parâmetros do modelo de formação de CO	139
4.3.7.3	Parâmetros do modelo de formação de HC	140
4.4	Simulação numérica do motor MWM operando no ciclo Otto	141
4.4.1	<i>Simulação diagnóstica utilizando o AVL Burn</i>	142
4.4.2	<i>Procedimento de validação</i>	144
4.4.3	<i>Critério de validação do modelo numérico operando no ciclo Otto</i>	146
4.4.4	<i>Definição do plano de simulações</i>	147
5	RESULTADOS	149
5.1	Resultados da avaliação diagnóstica	149
5.2	Validação do modelo numérico	153
5.2.1	<i>Simulação do modelo numérico no ciclo Diesel</i>	153
5.2.2	<i>Conversão do modelo numérico e validação no ciclo Otto</i>	154
5.3	Análise numérica do modelo operando no ciclo Otto alterando a razão volumétrica de compressão	162
5.3.1	<i>Evolução dos parâmetros de desempenho com a razão volumétrica de compressão</i>	162
5.3.2	<i>Variação da pressão e da temperatura com a razão volumétrica de compressão</i>	164
5.3.3	<i>Variação do número de octanas requerido com a razão volumétrica de compressão</i>	166
5.3.4	<i>Emissões de CO com a variação da razão volumétrica de compressão ...</i>	167
5.3.5	<i>Emissões de HC com variação da razão volumétrica de compressão</i>	168
5.3.6	<i>Emissões de NO_x com variação da razão volumétrica de compressão</i>	169
6	CONCLUSÕES	171
6.1	Sugestões para futuros trabalhos	172
	REFERÊNCIAS	173
	APENDICE A - Planos de simulação e validação do modelo numérico	181

ANEXO A - Tela inicial do AVL BOOST..... 182

ANEXO B - Elaboração dos combustíveis compostos no BOOST 183

1 INTRODUÇÃO

Um dos maiores compromissos da sociedade contemporânea é adaptar-se às novas condições climáticas, provocadas pelo aumento da temperatura média global, conhecer suas causas e mitigar os efeitos. Essas alterações têm relação provável com a progressiva elevação da concentração de dióxido de carbono (CO₂) atmosférico, principal gás de efeito estufa (GEE), decorrente de uma economia baseada amplamente em recursos fósseis e, conseqüente, à atividade ligada a produção e ao consumo desses recursos pelo sistema de transporte e de geração de energia elétrica.

É utilizada como referência para quantificar o CO₂ atmosférico, e demais GEE, a concentração molar do ano de 1750 (era pré-industrial) e que, provavelmente, começou a sofrer alterações por volta de 1784 com a invenção da máquina a vapor, por James Watt, marcando o início das emissões de CO₂ (ácido carbônico para a convenção da época) oriundo da utilização de combustíveis fósseis.

Pouco mais de um século depois, com o desenvolvimento do motor de ignição por centelha (1876) e do motor de ignição por compressão (1892), estimulados pelo descobrimento do petróleo na Pensilvânia (1859), intensifica-se a utilização de combustíveis fósseis, e em 1896, o químico sueco Svante Arrhenius alertou para a possível elevação da concentração atmosférica de ácido carbônico (ARRHENIUS, 1896).

Próximo ao fim do século, em 1988, o Dr. Hansen do *Goddard Institute for Space Studies* apresentou os resultados de sua pesquisa ao senado Norte Americano, afirmando que o planeta está mais quente no ano de 1988 do que em qualquer momento do histórico de medições instrumentadas (HANSEN, 1988).

E na última década, de acordo com o boletim de 2018 do WMO (*World Meteorological Organization*) com os seus dados apresentados na Tabela 1, ocorreu um aumento recorde no nível da concentração dos principais GEE. Todavia não é identificada uma tendência de redução, quando se observa o crescimento médio anual nos últimos dez anos, indicando que as medidas e as políticas atuais, para contenção dessas emissões, ainda não são eficazes (WMO, 2018).

Tabela 1 - Concentração molar média de GEE, últimos 10 anos - 2017

	CO₂	CH₄	N₂O
Concentração Global 2017	405,5 ± 0,1 ppm	1859 ± 2 ppb	329,9 ± 0,1 ppb
Concentração em 2017 relativa a 1750*	146%	257%	122%
Aumento absoluto entre 2016-2017	2,2 ppm	7 ppb	0,9 ppb
Aumento relativo entre 2016-2017	0,55%	0,38%	0,27%
Aumento anual médio em 10 anos	2,24 ppm/ano	6,9 ppb/ano	0,93 ppb/ano

*Assumindo a fração molar pré-industrial de: 278 ppm para CO₂, 722 ppb para CH₄ e 270 ppb para N₂O

Fonte: Adaptado de World Meteorological Organization and Global Atmosphere Watch, Greenhouse Gas Bulletin (2018)

Segundo a IEA (*International Energy Agency*) no mesmo ano (2017) o setor de energia, em todo o mundo, respondeu por aproximadamente dois terços do total de emissões de GEE (68%) e em torno de 80% das emissões de CO₂. E como referência, os maiores emissores de CO₂, em 2015, foram a China (28%), os Estados Unidos (17%), a Ásia (14%) e a Europa (8%). A América Latina, com 4%, apareceu em oitavo lugar. Vale ressaltar que, no mesmo período, a China, os Estados Unidos, a Europa e o Japão, juntos, consumiram mais da metade do petróleo produzido no mundo (HEYWOOD et al., 2015).

Em contrapartida, as emissões brasileiras em 2017 responderam por 1,4% das globais, contrário a participação dos maiores emissores de GEE, uma vez que não tem significativa participação do carvão em sua matriz energética primária. O setor de energia brasileiro (Produção e Consumo de Combustíveis e Energia Elétrica) responde por 70% das emissões de CO₂, sendo o subsetor transportes responsável por quase metade (48,2%) dessas emissões (SEEG, 2018).

O problema central relativo às emissões está relacionado a decomposição do CO₂, realizada por fotossíntese, uma reação redutora contrária à da combustão. No entanto, a capacidade vegetal é muito inferior à quantidade liberada atualmente. Por outro lado, se for utilizado um combustível renovável, as emissões de CO₂ resultantes da combustão, do processo de produção e transporte são compensadas pela quantidade capturada pelo próprio cultivo do insumo utilizado na sua produção. (BAËTA; PONTOPPIDAN; SILVA, 2015; LANZANOVA; NORA; ZHAO, 2016; NOUR et al., 2017; SARI et al., 2018; TAVARES et al., 2014).

Uma das opções para a redução nas emissões de CO₂ é a transição, mesmo que gradativa, de uma economia baseada em recursos fósseis por alternativas renováveis. No quinto relatório do IPCC (*Intergovernmental Panel for Climate Change*, 2013) e no boletim do WMO (*World Meteorological Organization, Greenhouse Gas Bulletin*, 2017) essa necessidade de transição é evidenciada. As informações contidas nesses documentos atestam para a mudança do conceito: grau de certeza “provável”, probabilidade de ocorrência (66%) para “muito provável” (90%), indicando que o aumento da temperatura, observada no século XX, é consequência de atividades antropogênicas. Esses documentos também afirmaram que, entre as principais atividades que contribuem para o aumento nas emissões de GEE está a utilização de combustíveis fósseis pelo sistema de transporte e de geração de energia elétrica.

O Brasil, em 2017, de acordo com o Anuário Estatístico Brasileiro de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis produziu 28,6 milhões de m³ de etanol (anidro e hidratado). Neste mesmo ano, conforme estudo de Montes (2017), o Estados Unidos (EUA) foi o maior produtor mundial de etanol a partir do milho. Nesse mesmo período o Brasil foi o maior produtor mundial de etanol a partir da cana-de-açúcar. A região sudeste, maior produtora nacional, foi responsável por 58,3% da produção no ano de 2017, seguido pelo Centro-oeste (31,4%) e Nordeste com 5% (MIGUEL et al. 2018).

Também em 2017, o RenovaBio (Política Nacional de Biocombustíveis), um programa de expansão da produção e fomento da utilização de biocombustíveis no Brasil, com o objetivo de contribuir para as metas de redução de GEE, firmadas no Acordo de Paris para o clima (COP21), foi instituído por lei (13.576/2017) pelo Ministério de Minas e Energia. O RenovaBio é uma política de Estado com objetivo de reconhecer o papel estratégico dos biocombustíveis na matriz energética brasileira, tanto para a segurança energética quanto para a redução das emissões de GEE.

O Brasil continuou trabalhando para atingir suas metas de reduções de GEE promovendo a utilização de combustíveis renováveis, a continuidade da evolução de tecnologias que possam tornar os motores a combustão interna mais eficientes e o fez através da concessão de benefícios fiscais. E em dezembro de 2018 o Governo Federal sancionou através de medida provisória o programa Rota 2030 em substituição ao Inovar-Auto com duração de quinze anos e tendo como um dos objetivos o desenvolvimento de veículos mais eficientes e mais seguros.

Com o programa Rota estima-se para 2022 um aumento de 11% na eficiência em relação ao que foi alcançado pelo Inovar-Auto. O governo abaixou a alíquota para os carros elétricos e híbridos e os híbridos, que aceitem etanol (flex), terão ainda um desconto extra de dois pontos percentuais no imposto sobre produtos industrializados (IPI).

Diante da imposição de limites cada vez mais restritivos nas diretrizes da legislação, relativa às emissões de GEE, para veículos automotores, faz-se necessário, além da transição da matriz energética primária, a continuidade na evolução do desenvolvimento de tecnologias que possibilitarão gradativamente adaptar-se a essas restrições. A utilização do etanol, avaliando o cenário energético brasileiro atual, pode contribuir para o cumprimento das metas de reduções em curto prazo. No entanto, é preciso realizar mais estudos que contribuam para o desenvolvimento de tecnologias que permitam sua utilização tanto em motores do ciclo Otto quanto em motores do ciclo Diesel e que, possam ser aplicados ao sistema de transportes e de geração de energia elétrica.

1.1 Objetivos

O objetivo geral deste trabalho é realizar simulações numéricas de um motor a combustão interna originalmente do ciclo Diesel, convertido para operação no ciclo Otto utilizando etanol hidratado combustível (EHC) e etanol sobre-hidratado (ESH).

Os objetivos específicos desta pesquisa são:

1. Desenvolver um modelo numérico da operação de um motor do ciclo Diesel, por meio do *software* AVL Boost®, e validá-lo a partir de resultados experimentais;
2. Caracterizar numericamente o comportamento deste motor, convertido para operar no ciclo Otto com a razão volumétrica de compressão original, injeção indireta de etanol hidratado com índices de hidratação variando de 7% a 47% v/v e formulados a partir do etanol hidratado combustível comercial;

3. Avaliar os efeitos da razão volumétrica de compressão variando de 17:1, 18:1, 19:1, 20:1, 21:1 e 22:1 e dos níveis de hidratação, no consumo específico e na eficiência global;
4. Avaliar a influência da razão volumétrica de compressão e do índice de hidratação nas emissões de monóxido de carbono (CO), hidrocarbonetos não queimados (HC) e óxidos de nitrogênio (NO_x) nas configurações propostas.

1.2 Justificativa

Poucos estudos foram realizados sobre a utilização de EHC e ESH em motores a ignição por compressão, em substituição ao óleo diesel. É notável a viabilidade de realizar pesquisas sobre a utilização de biocombustíveis em motores do ciclo Diesel, em função da possibilidade de redução nas emissões de GEE e da dependência econômica do petróleo.

Esse trabalho se justifica a partir da possibilidade de contribuir para o conjunto de estudos que contemplam a redução em emissões de GEE, propondo a substituição de um combustível fóssil por um renovável, o etanol, um combustível nacional, de baixo carbono e amplamente disponível ao mercado consumidor. Em um segundo ponto é explorada a facilidade de combinar possibilidades que envolvam não somente uma análise experimental, mas também uma abordagem numérica que permitirá que novas estratégias possam ser desenhadas para que a operação de motores originalmente projetados para operar com um combustível fóssil seja convertida para a operação com um combustível renovável.

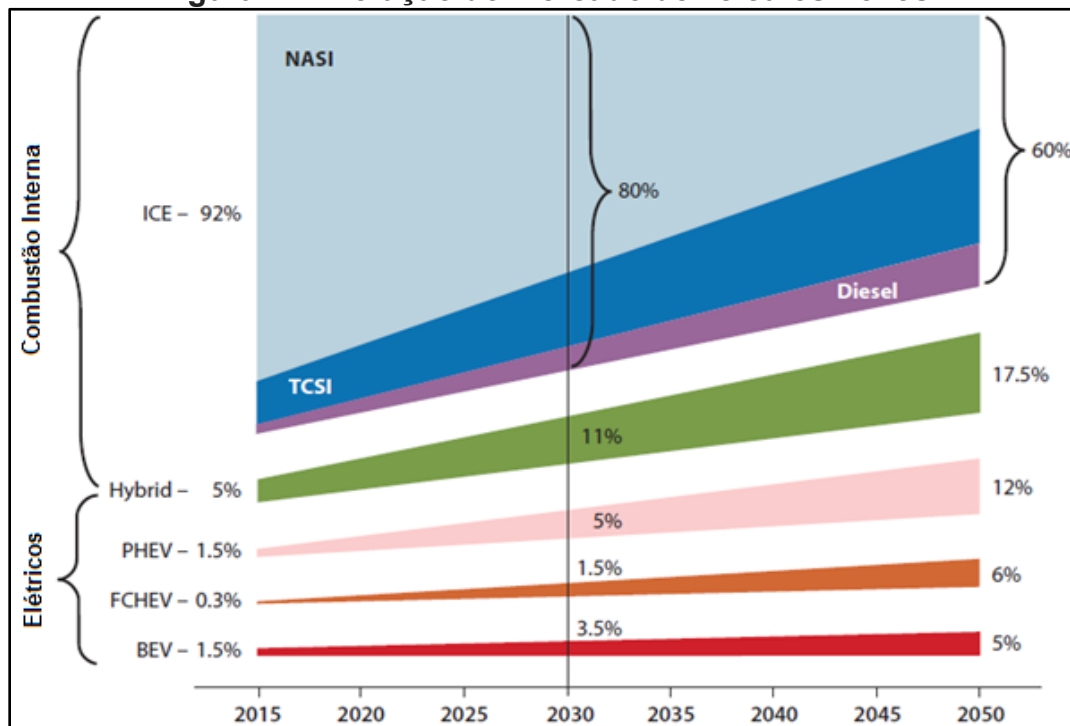
Com o objetivo de avaliar a possibilidade de redução em emissões de GEE foram considerados três pontos fundamentais. No primeiro foi determinada a meta de referência para reduções de CO₂ até 2050. No segundo foi utilizando uma projeção de comportamento do mercado consumidor de veículos automotores mostrando a tendência de desenvolvimento e utilização de novas tecnologias, também até 2050; e o terceiro ponto comparou o impacto da utilização do etanol contrapondo as principais tecnologias, desenvolvidas e em desenvolvimento, que têm como objetivo a redução de emissões, avaliando a viabilidade da aplicação no sistema de transporte brasileiro.

Em seu último relatório referente a mudanças climáticas, o IPCC (Painel Intergovernamental sobre Mudanças Climáticas) divulgou as metas de redução nas

emissões de GEE para que o aumento da temperatura média global seja mantido em 2°C, preferencialmente 1,5°C. Os dados apontam para reduções de, no mínimo, 49% para o ano de 2030 e que em 2050 seja atingida a condição de neutralidade nas emissões de CO₂, referente aos dados atuais de emissões (UNITED NATIONS ENVIRONMENT PROGRAME, 2018).

De acordo com Heywood et al. (2015), existem várias projeções, como a apresentada na Figura 1, sugerindo que em 2030, entre 10% e 25% dos veículos serão eletrificados. Ainda resta a faixa de 90% a 75%, representando os veículos leves, caminhões e navios que ainda operarão com o óleo diesel ou a gasolina.

Figura 1 - Evolução do mercado de veículos novos



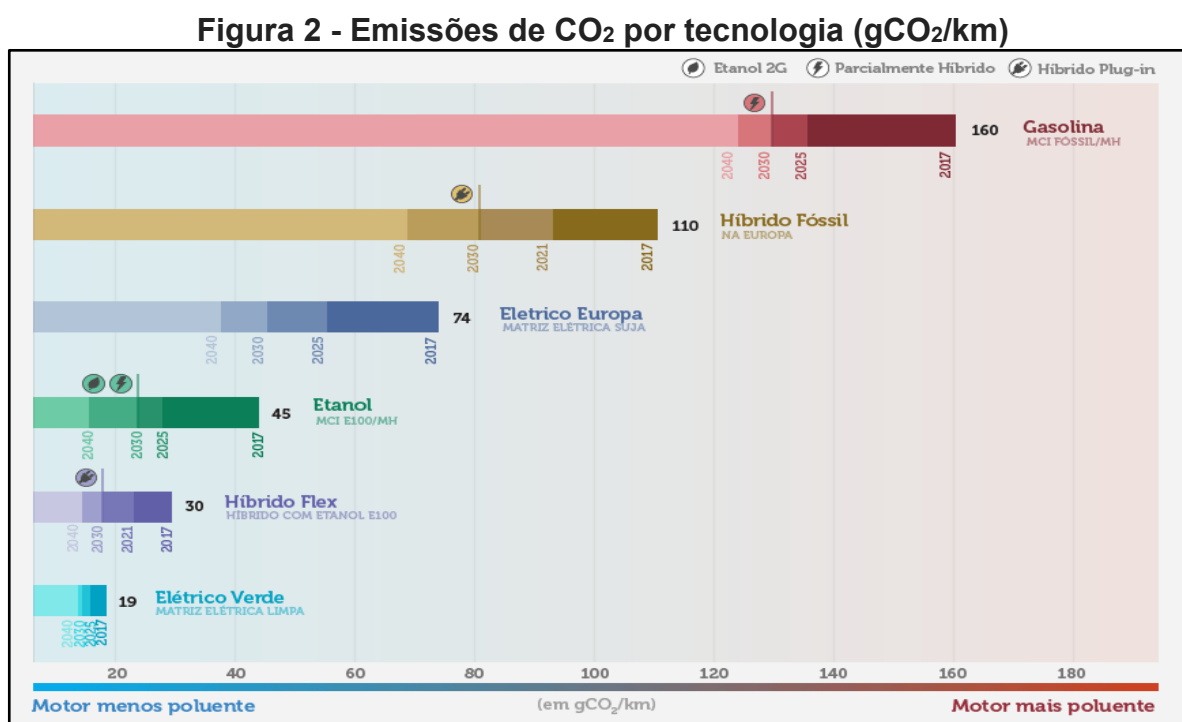
Fonte: Adaptado de Heywood et al., (2015)

PHEV - Plug-in Hybrid Eletric Vehicle
 FCHEV - Fuel Cell Hybrid Eletric Vehicle
 BEV - Battery Eletric Vehicle.

A projeção ainda aponta para uma frota de 60% de veículos que ainda utilizarão combustíveis fósseis em 2050, com tendência no aumento de veículos turbo alimentado (TCSI, *Turbo Compressor Spark Ignition*) e redução dos veículos naturalmente aspirados (NASI, *Naturally Aspirated Spark Ignition*). Essa projeção é baseada em dados de vendas de veículos novos nos Estados Unidos da América

(EUA) e o autor destaca que os principais mercados consumidores mundiais têm comportamento semelhante, exceto os países que optaram pela completa eletrificação de seu sistema de transportes.

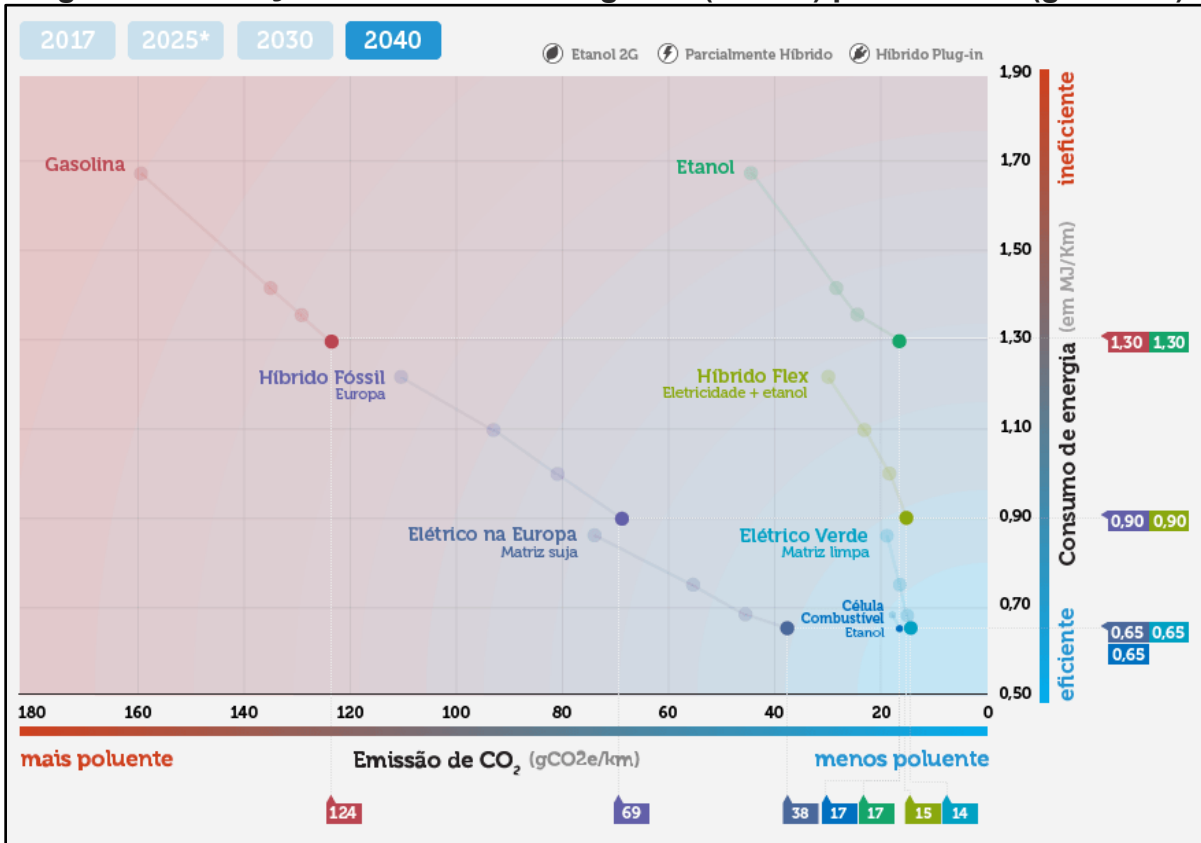
Quanto às projeções para utilização de combustíveis para as próximas décadas, conforme a Figura 2, considerando o potencial energético e o cenário nacional realizado em 2018 pela AEA (Associação Brasileira de Engenharia Automotiva), a produção do etanol de segunda geração associado ao etanol de primeira geração apresenta a maior perspectiva de redução nas emissões de GEE ao preço do aumento no consumo específico, quando comparado ao elétrico nacional. Por outro lado, se associado à tecnologia híbrida (híbrido flex) pode-se elevar a eficiência em 30%, compensando o aumento no consumo específico, observado na Figura 3, com o mesmo nível de emissões para 2040 dos menos poluentes: elétricos, célula de combustível a base de etanol (emissões < 20 gCO₂/km em 2040) (NOVA CANA, 2018).



Ainda, considerando a expansão brasileira da produção de etanol, sua utilização, em curto prazo, pode ser uma solução tangível para a redução de emissões de GEE do setor de transportes (JAISWAL et al., 2017; SAXENA et al., 2012).

De acordo com os dados de previsão para redução nas emissões de CO₂, por fonte de energia utilizada, apresentado na Figura 3, é notável a potencial presença do etanol entre as opções energéticas futuras, aplicadas tanto ao sistema de transporte brasileiro quanto a geração de energia elétrica.

Figura 3 - Evolução do consumo energético (MJ/km) por emissão (gCO₂/km)



Fonte: Nova Cana (2018)

Por fim, a utilização de etanol com elevados índices de hidratação (ESH, Etanol Sobre-hidratado, 10 a 30% de água v/v) é uma possibilidade de redução no custo de produção tornando sua utilização mais atrativa e viável. A vantagem é obtida através da redução no consumo de energia (~37%) empregada no processo de destilação e desidratação para a obtenção do combustível na condição azeotrópica, como o Etanol Hidratado Combustível (EHC - 95,1 a 96% de etanol v/v) e o Etanol Anidro Combustível (EAC - 99,6% de etanol v/v). Adicionalmente, com o surgimento do etanol de segunda geração a produção poderá ser elevada em até 52% sem ampliar a área de cultivo (AMBRÓS et al., 2015; KHALIQ; TRIVEDI; DINCER, 2011; LANZANOVA; SARI, 2015; MACK; ACEVES; DIBLE, 2009; MARTINS; LANZANOVA e SARI, 2015).

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Esse capítulo apresenta estudos envolvendo simulações numéricas e trabalhos experimentais avaliando alterações na razão volumétrica de compressão e a utilização de EHC e ESH em substituição a combustíveis fósseis.

O etanol sobre-hidratado (hidratações acima às do limite do etanol comercial 7% v/v) e seus diferentes índices de hidratação são representado pela letra “E”, seguido por seu percentual de etanol (v/v) e a água, pela letra “W”, seguida de seu percentual (v/v), na forma ExxWyy, como no exemplo: E80W20, que equivale a 80% de etanol e 20% de água (v/v).

2.1 Utilização de etanol combustível e a influência da razão volumétrica de compressão

Brusstar et al. (2002) desenvolveram um trabalho experimental com um motor 1,9L, originalmente do ciclo Diesel, quatro cilindros, turbo alimentado, utilizando etanol, metanol, injeção indireta PFI (*Port Fuel Injection*) e variando a razão volumétrica de compressão entre 17:1 e 22:1, porém os resultados são apresentados para a razão volumétrica de 19,5:1. O motor operou com razão ar/combustível estequiométrica e a carga foi controlada através da quantidade de EGR (*Exhaust Gas Recirculation*) e pressão no duto de admissão, o que permitiu a redução de perdas com o bombeamento. Os resultados mostraram que a operação com metanol, quando comparada com o óleo diesel apresentou eficiência térmica pouco mais de 40%, na região de 6,5 bar a 15 bar pressão média efetiva (BMEP), entre 1200 rpm a 3500 rpm, atingindo baixas emissões e exigindo estratégias convencionais de pós-tratamento para gases de exaustão. Emissões similares foram alcançadas utilizando o etanol, porém, o consumo específico de combustível foi levemente maior em função da limitação no avanço de ignição para elevadas razões de compressão (19,5:1). O motor adaptado para operar com estes combustíveis apresentou níveis de eficiência térmica maiores do que quando utilizado o óleo diesel, sendo um potencial substituto, alternativo e renovável, a utilização de combustíveis fósseis, devido também ao baixo custo do sistema PFI.

Em estudos realizados nos últimos 30 anos e em seu trabalho, Brusstar et al. (2002) observaram que a utilização de combustíveis formados puramente por álcoois, bem como misturas adicionadas a combustíveis fósseis, apresentam possibilidade de redução em emissões de NO_x , PM (material particulado) e melhora na eficiência térmica.

Amorim (2005) avaliou experimentalmente o desempenho, diante dos efeitos de alteração da razão volumétrica de compressão, de um motor *flex*, multicomcombustível, alimentado com álcool etílico, gasolina e gás metano veicular (GMV). Uma central programável foi calibrada com os três combustíveis propostos e as razões volumétricas de compressão de 11:1, 12,5:1 e 15:1, obtidas a partir da troca dos jogos de pistões. O autor observou que com a elevação da razão volumétrica de compressão melhorias em eficiência foram obtidas somente com o GMV. Os avanços de ignição para o GMV e etanol e com a razão de volumétrica compressão de 15:1 foram iguais ou menores que os da gasolina em 11:1, concluindo que o aumento na pressão interna do cilindro, para estes combustíveis, é tecnicamente viável. Esse fato deve-se ao avanço, mesmo em pressões elevadas, estar em níveis aceitáveis para aplicação da sobrealimentação podendo aumentar o desempenho do motor.

Mack, Aceves e Dibble (2009) analisaram os efeitos da operação de um motor originalmente do ciclo Diesel alimentado com etanol em diferentes níveis de hidratação, com razão volumétrica de compressão de 17:1 e em regime HCCI (Ignição por Compressão de Carga Homogénea). O índice de hidratação do etanol foi variado de 0% a 40% de água (v/v) com incrementos de 10% e, também com 60% de água (v/v). A presença da água atrasa o início da combustão sendo necessário pré-aquecer o ar na admissão para vaporizar a mistura (etanol-água). Esse fato deve-se ao alto calor latente de vaporização da mistura. O motor operou de maneira estável com hidratações até 40%, limitado pela potência do resistor elétrico utilizado para pré-aquecimento do ar na admissão. A curva da taxa de liberação de calor manteve-se constante para todos os valores de hidratação. O aumento da proporção de água resulta em queima incompleta ocasionando elevadas emissões de HC, CO e redução na concentração de O_2 nos gases da exaustão. A emissão de NO_x foi extremamente baixa, característica de operação em regime HCCI.

Costa e Sodré (2010) compararam o desempenho e emissões de um motor 1.0, quatro tempos, alimentado com EHC (6,8% de água em etanol v/v) e gasolina (gasolina mais etanol, 78% de gasolina e 22% de EAC). Os parâmetros de

desempenho avaliados foram: torque, potência, BMEP, consumo específico de combustível (SFC) e eficiência térmica. Também foram avaliadas as emissões de CO, CO₂, HC e NO_x. Os resultados mostraram que o torque e BMEP foram maiores quando utilizado a gasolina a baixas velocidades e EHC para altas velocidades. Para toda a faixa de rotação avaliada, o etanol apresentou maior eficiência térmica, maior consumo específico de combustível, menores emissões de CO, HC e aumento nas emissões de CO₂ e NO_x. A necessidade de avanço de ignição, para o EHC, para obtenção de maior potência, é a causa do aumento de NO_x. De acordo com os resultados avaliados pelos autores, a utilização do EHC somente é viável se o seu custo for no máximo 72% do preço da gasolina.

Costa e Sodré (2011) avaliaram experimentalmente a influência da razão volumétrica de compressão, no mesmo motor do estudo de Costa e Sodré (2010), alimentando-o com o EHC, gasolina e variando a razão volumétrica de compressão de 10:1, 11:1 e 12:1. Os parâmetros de desempenho avaliados neste estudo são os mesmos do estudo anterior, porém foram acrescentadas a eficiência volumétrica e a temperatura dos gases de exaustão. Altas razões volumétricas de compressão ocasionam aumento da pressão interna do cilindro aumentando assim, o trabalho realizado pelo pistão e conseqüentemente o torque e o BMEP. Os resultados apresentados mostraram que com o aumento da razão volumétrica de compressão há melhora no desempenho de ambos os combustíveis em toda a faixa de rotação investigada, com melhores resultados para o etanol hidratado para região de altas rotações e levemente maior para a gasolina em baixas e moderadas rotações. Para ambos os combustíveis o consumo específico diminui com o aumento da razão de compressão volumétrica e houve aumento na eficiência térmica. A utilização do etanol hidratado com a razão volumétrica de compressão de 12:1 produziu eficiência térmica maior do que em todas as condições testadas. Os autores concluíram que a razão de compressão volumétrica é um parâmetro para o aumento da eficiência térmica quando se utiliza etanol hidratado.

Khaliq, Trivedi e Dincer (2011) aplicaram o modelo conceitual HCCI para uma análise computacional e experimental, utilizando etanol sobre-hidratado. Através da primeira e segunda lei da termodinâmica avaliou-se a influência da temperatura, os efeitos da razão de compressão e eficiência adiabática do turbo compressor. A primeira lei da termodinâmica descreve somente a conversão de energia no sistema e não é possível prever a origem de ocorrência de irreversibilidades. Com a

modelagem da segunda lei, foi possível identificar associações de irreversibilidades, perda de exergia com o processo de combustão, transferência de calor e permitiu a avaliação termodinâmica mais precisa em ciclos de potência. Para o aparato experimental, assumiu-se carga e rotação constantes, razão dinâmica de compressão de 16:1, índice de hidratação de 65% (v/v) de água em etanol, regenerador para transferência de calor do sistema de exaustão para aquecer os gases de admissão, vaporizador de combustível e conversor catalítico para tratamento de HC e CO, que não reagiram durante a combustão. O estudo de exergia mostrou que a maior irreversibilidade em todo o sistema ocorre em processos dentro do motor. Os parâmetros de eficiência, caracterizados pela primeira e segunda lei, comportaram-se como função crescente em relação ao aumento da razão de compressão dinâmica pelo turbo-compressor e decrescente em relação ao aumento da temperatura ambiente.

Saxena et al. (2012) em continuação à análise feita por Mack, Aceves e Dibble (2009), utilizaram a mesma configuração experimental, acrescentando um regenerador de calor para aproveitar a temperatura dos gases da exaustão. O regenerador (trocador de calor) foi utilizado para vaporizar a mistura ar combustível na admissão e eliminar o aquecimento externo por resistência elétrica. A utilização da entalpia dos gases de exaustão, através do regenerador, permitiu operação com ESH na proporção E80W20. O aparato experimental, sem utilização de energia externa, melhora o balanço energético para combustíveis hidratados.

Sementa, Vaglieco e Catapano (2012) realizaram uma caracterização termodinâmica e óptica de um motor GDI (*Gasoline Direct Injection*), 4 cilindros, de alto desempenho, turbo alimentado, razão volumétrica de compressão de 9,5:1, operando com injeções adiantadas (homogênea) e injeções mais atrasadas (estratificada) de gasolina e bioetanol, onde a estratégia de injeção é determinada pelo início e duração da injeção. Os testes foram realizados mantendo a razão A/F estequiométrica para 1000 rpm e 1500 rpm (carga média) representando a NEDC (*New European Driving Cycle*) vigente na data do estudo. Medições por imagens foram realizadas para investigar o *spray* e a evolução da combustão utilizando a gasolina (RON 95), bioetanol puro e, para essa análise, o cabeçote foi instrumentado com sistema de endoscópio acoplado. Os autores observaram, através das imagens obtidas, que a frente de propagação da chama é dependente da turbulência e do A/F, aumentando com o aumento da turbulência e com a distribuição local do combustível.

O *spray*, formado pela injeção da gasolina, é mais sensível à pressão e ao movimento do ar admitido enquanto as divisões do *spray* do etanol são mais compactas e não se alteram com a pressão ou com a duração da injeção. Para ambos os combustíveis, na primeira fase da combustão, a frente de chama estratificada se propaga mais rápida (40%) do que a homogênea em razão da distribuição espacial inicial do A/F, além disso, a queima do combustível impregnado no *bowl* do cilindro produz uma quantidade maior de material particulado e HC. Particularmente, a combustão do etanol com a injeção estratificada apresentou maiores taxas de queima e maiores picos de pressão (25%) a 1000 rpm. As chamas produzidas pela combustão do etanol apresentaram menores pontos brilhantes associados a menores emissões de fuligem. O uso do etanol juntamente com a injeção estratificada proporciona uma melhora na estabilidade da combustão e redução nas emissões de PM e HC.

Ambrós (2013) propôs a elaboração de um modelo matemático, utilizando o *Matlab*, com possibilidade de prever os efeitos da hidratação do etanol no desempenho de motores a combustão interna. O autor utilizou misturas de etanol com percentuais de 10% a 40% de água (v/v): 10% (E90W10), 20% (E80W20), 30% (E70W30) e 40% (E60W40) e duas condições operacionais do motor: ignição fixa e avanço livre para obtenção de máximo torque. O modelo foi capaz de simular os gradientes de pressão e temperatura. Apresentou capacidade de previsão de desempenho do motor avaliado a partir da potência, torque, eficiência térmica e consumo específico de combustível. O autor relatou que para o consumo específico de combustível o erro foi maior que 20% e para os demais parâmetros avaliados os erros relativos foram menores que 7%. Uma parcela considerável do erro está associada à condição adotada na simulação em que a mistura ar-combustível encontra-se totalmente vaporizada. Nas duas condições operacionais propostas, o E70W30, apresentou melhores resultados de potência, torque, consumo específico e menor temperatura dos gases de exaustão. O E60W40 e o E90W10 apresentaram os desempenhos mais baixos e, comparando as duas condições, ponto de ignição fixo e MBT (ponto de máximo torque), o MBT apresentou melhores resultados de desempenho em todas as condições propostas.

Breaux e Acharya (2013) realizaram um estudo para avaliar a viabilidade de utilização do etanol hidratado como combustível em substituição a combustíveis fósseis. Experimentos foram realizados em um combustor de *swirl* estabilizado e com índices de hidratação variando de 0% a 40% de água (v/v) e razões de equivalência

estequiométrica F/A variando de 0.6, 0.8, 1.0 e 1.1, representando misturas extremamente pobres, pobres, estequiométrica e ricas, respectivamente. Chamas estabilizadas foram obtidas com índice de hidratação até 35% e os resultados mostraram que a taxa de calor dos gases de exaustão, eficiência da combustão e eficiência térmica do combustor não foram afetadas por índices de hidratação até 20%. Contudo, houve diminuição da temperatura da chama. As consequências práticas da combustão do etanol hidratado revelam considerável diminuição na temperatura dos gases de exaustão e reduções nos picos de temperatura ocasionando redução nas emissões de NO_x . Os autores concluíram que o etanol, com índice de hidratação até 20% (v/v), pode ser potencialmente utilizado em substituição ao etanol anidro e a combustíveis fósseis e, hidratação de 15% (v/v), pode gerar economia de até 25% de energia no ciclo de produção deste combustível.

Brito Jr. et al. (2013) detalharam o desenvolvimento de um motor de alto desempenho, alimentado com etanol hidratado e capaz de atingir 42% de eficiência térmica, similar a um motor do ciclo Diesel, porém, operando no ciclo Otto. O motor foi desenvolvido baseado em um motor diesel, 12L, de bloco longo, seis cilindros e potência máxima de 350 kW @1800 rpm, utilizando simulação numérica computacional, desenvolvimento de materiais e componentes específicos, aplicação de turbo e controle de calibração. O foco principal do projeto foi a durabilidade, desempenho e eficiência, atingindo os mesmos níveis de um motor a diesel. O pistão deve possuir diâmetro máximo de 130 mm para evitar maiores incidências de detonação. Um outro ponto foi a substituição do pistão para alterar a razão volumétrica de compressão de 18:1 para 11:1, ideal, neste caso, para obtenção de cargas próximas a 20 bar de BMEP além da substituição das válvulas para operar com etanol hidratado. O processo de calibração foi melhorado para a redução de variações cíclicas e consequente aumento na eficiência térmica. Porém, foi observado que, para pequenas melhoras no consumo específico de combustível, emissões de NO_x aumentaram significativamente e o autor ressaltou que a estratégia de calibração poderia ser alterada para redução das emissões de NO_x . Os autores concluíram ainda que o motor desenvolvido poderia ser utilizado em outras aplicações, onde o combustível tem baixo preço e logística facilitada (ônibus urbanos, caminhão e colheitadeira de cana-de-açúcar) e principalmente naquelas que visam à redução das emissões de material particulado e a utilização de um combustível de origem renovável. Na medida em que a legislação de emissões for sofrendo alterações, a

estratégia de calibração do motor pode ser alterada para se adequar aos novos parâmetros.

Munsin et al. (2013) realizaram estudo experimental em um pequeno grupo gerador com motor a ignição por centelha, com objetivo de investigar os efeitos da concentração de água no etanol (até 40% v/v) e da variação de carga no desempenho e emissões. O aumento na concentração de água reduz a eficiência global e emissões de NO_x enquanto HC, CO, formaldeído (HCHO) e acetaldeído (CH₃CHO) aumentaram. Após o catalisador, esses índices foram reduzidos e obedeceram aos limites EPA (*United States Environmental Protection Agency*) para o ano de 2011. Em consequência do aumento da carga, houve aumento da eficiência global enquanto HC, HCHO e CH₃CHO diminuíram. Adicionalmente, emissões de CO, HC + NO_x após o catalisador, foram menores que os limites EPA-2011. O ESH com até 40% do volume de água e utilização de catalisador foi recomendado para operação de motores SI em grupos geradores. Os autores recomendaram posterior avaliação de desgaste, durabilidade do motor, contaminação do óleo e entupimento do filtro de combustível.

Balki, Sayin e Canakci (2014) realizaram um estudo experimental sobre os efeitos da utilização de etanol e metanol, em comparação com a gasolina, no desempenho, emissões e características da combustão de um motor monocilindro de baixa potência (2 kW). Os autores observaram que o uso de álcoois como combustível elevou o torque, o consumo específico de combustível, a eficiência térmica, e ocorreram reduções nas emissões de HC, CO e NO_x. Os autores concluíram que o uso de combustíveis alcoólicos apresentou melhoras no desempenho em altas rotações.

Saxena et al. (2014) estudaram a melhor condição de operação de um motor em regime HCCI, para geração de energia, utilizando o etanol sobre-hidratado, com índices de hidratação de 0% a 30% de água v/v e regeneração de calor dos gases de exaustão. O que diferenciou o estudo dos trabalhos anteriores foi o controle do início da combustão através do controle da temperatura dos gases de admissão ao passar por um trocador de calor que tem os gases de exaustão como fluido secundário. A condição adotada para obtenção de melhor eficiência foi a baixa incidência de detonação. Melhores condições foram observadas com altas pressões de admissão, baixo teor de hidratação e atraso no início da combustão (próximo de 8 °CA DPMS). Baixo teor de hidratação resulta em mais energia inserida no sistema. Combustões atrasadas permitem maior potência pois uma quantidade menor de calor é transferida

para as paredes do cilindro. A água é um diluente não reativo que possui alto calor latente de vaporização e atua reduzindo os picos de temperatura no cilindro, contribuindo para redução nas emissões de NO_x . Emissões de HC e CO aumentaram com a hidratação e baixas pressões de admissão, as emissões de CO são observadas em combustões atrasadas. Para as emissões de HC e CO, o catalisador de oxidação é recomendado e de acordo com as temperaturas de exaustão medidas, observou-se a possibilidade de utilização. A melhor operação do motor ocorreu utilizando o etanol com hidratação de 30% v/v (E70W30) atingindo 7,25 bar de IMEP, com baixa incidência de detonação e emissões de NO_x .

Ambrós et al. (2015) realizaram uma análise experimental junto a uma modelagem numérica de um motor Agrale, originalmente do ciclo Diesel, monocilindro, razão volumétrica de compressão 12:1, operado com misturas de etanol hidratado, com índices de 10% a 40% de água v/v, com incremento de 10%. Os testes experimentais obedeceram duas condições: ponto de ignição fixo e variável para obtenção de máximo torque. Para a modelagem matemática foram admitidos: o ciclo Otto, modelo *Viebe* duas zonas e a primeira lei da termodinâmica foram modelados para determinar o estado termodinâmico em função do $^\circ\text{CA}$. Para o volume de controle, consideraram-se válvulas fechadas e para a variação da massa no cilindro, somente perda pelos anéis. A transferência de calor no sistema pode ser expressa em termos de calor transferido pela massa queimada e não queimada para as paredes. A correlação de *Hohenberg* foi utilizada por ser mais precisa, necessitar de menor tempo para convergência e a geometria da câmara de combustão corresponder à geometria Diesel, sendo este modelo mais utilizado. Todas as derivadas da simulação foram modeladas em função do ângulo do virabrequim ($^\circ\text{CA}$), pressão (p) e temperatura (T). A composição dos produtos foi determinada pelo modelo de equilíbrio químico de *Ferguson*, possibilitando o cálculo da entalpia, da entropia, do volume específico e energia interna. O modelo foi capaz de estimar os gradientes de pressão e temperatura com erros relativos menores que 13%. Os dados experimentais, juntamente com os modelos, podem ser utilizados para observar parâmetros de operação do motor em função do nível de hidratação. Os autores concluíram que a utilização de etanol hidratado é viável quando utilizado o controle do avanço de ignição para obtenção de máximo torque, sendo o controle fundamental para uma combustão eficiente. Em todos os testes, a mistura E70W30 apresentou os melhores resultados de potência, torque, eficiência e consumo específico, seguido pela E80W20.

Baêta, Pontoppidan e Silva (2015) realizaram um estudo com o propósito de avaliar a possibilidade de substituição de motores de alto deslocamento volumétrico, normalmente aspirados, por motores com injeção direta de etanol hidratado combustível (EDI), *down-sized* e turbo alimentado. Alterações foram efetuadas em um motor 1,4 litros após avaliações numéricas computacionais como: otimização do *layout* da câmara de combustão, alterações nos assentos e diâmetro das válvulas de admissão e escape, otimização de volume do *plenum* de exaustão e na sequência, adaptação de turbo alimentação de dois estágios. Avaliações experimentais foram realizadas com outro motor 2,4 litros de igual torque e potência, normalmente aspirado para comparação ao motor 1,4 litros, que produziu uma curva de torque plana com valor próximo a 290 Nm. O torque produzido pelo motor 2,4 litros foi inferior (~200 Nm). Um motor 3,0 litros, seis cilindros, também foi testado e os testes indicaram um pico de torque de 280 Nm. Com estes resultados foi possível constatar que o torque produzido pelos dois motores, normalmente aspirados de maior deslocamento, foi menor que o 1,4L, *down-sized* e turbo alimentação de dois estágios. Reduções nas emissões HC (18%) e NO_x (12%) foram obtidas em função da melhora na distribuição da mistura ar/combustível no interior do cilindro e utilização de EGR refrigerado. Uma melhora no consumo de combustível de 28%, obtido pelo motor 1,4 litros, em baixa rotação, EDI (Injeção Direta de Etanol), turbo alimentação em dois estágios, pode compensar o aumento do consumo de combustível em motores a combustão interna, projetado pela utilização de etanol. Essa configuração *down-sized* permitiu competir com a utilização de motores a diesel com um custo bem inferior.

Bilhão (2015) realizou um estudo de viabilidade técnico-econômica do uso do ESH, com índices de hidratação de 10%, 15% e 20% de água v/v, em um motor do ciclo Otto, com gerenciamento eletrônico programável para variação da calibração do motor, através da análise de resultados de desempenho. O autor estimou que a utilização da mistura E85W15, como combustível, é uma opção economicamente viável e o recomendou como substituto ao etanol hidratado a fim de aumentar o retorno econômico, já que a economia de energia no processo de destilação é aproximadamente quatro vezes menor em relação ao etanol hidratado.

Dardiotis et al. (2015) testaram misturas de etanol (E5, 5% de etanol v/v em gasolina; E75, 75% etanol v/v em gasolina e E85, 85% de etanol v/v em gasolina) em dois veículos *flex*, utilizando um motor com injeção direta (DI), turbo alimentado (Euro 5) e o outro motor com injeção indireta (PFI) (Euro 4). De acordo com a certificação

Euro 5, as propriedades dessas três misturas de etanol mais gasolina, vendidas no mercado europeu, devem ser avaliadas quando são investigadas as emissões em veículos a combustão interna. As emissões de CO e HC, na partida a frio de motores a gasolina, em ambientes de baixas temperaturas (-7 °C teste tipo VI) é um dos testes de emissões para homologação de novos veículos leves na Europa. Portanto, os autores avaliaram o desempenho dos dois motores FFV (*Fuel Flex Vehicles*) utilizando também o teste *Type VI*. As misturas E5 e E85 foram avaliadas a temperatura de 22 °C e para temperatura ambiente baixa (-7 °C) o E5 e o E75 foram utilizados. Na Europa, durante o inverno, o E85 para veículos FFV é substituído pelo E75 por conter uma fração menor de etanol, a fim de evitar problemas associados à partida a frio do motor. Os motores foram testados de acordo com a NEDC (*New European Driving Cycle*) referente ao ciclo urbano e ao CADC (*Common Artemis Driving Cycle*), que é um ciclo de partida a quente e envolve três segmentos representativos: ciclo urbano, rural e autoestrada. De acordo com os resultados apresentados, os autores concluíram que, em condições normais de temperatura (22 °C), nos dois ciclos testados, as emissões de CO diminuíram para as misturas de combustível com maiores frações de etanol (E75 e E85). As emissões de HC, praticamente não foram afetadas pelo tipo de combustível. As emissões de NO_x, diminuíram para ambos os motores no ciclo NEDC, enquanto que no ciclo CADC, exibiram comportamentos diferentes. Para os testes em baixa temperatura (-7 °C), tanto as emissões de CO quanto de HC aumentaram com o aumento do índice da quantidade de etanol.

Martins e Lanzasova (2015) realizaram simulação numérica 1-D utilizando o *software GT-Power*, baseado em um *Cummins 4BT 3,9-G4*, SI, operando no ciclo Miller, carga máxima, alimentado com etanol hidratado combustível, com diferentes configurações de abertura de válvula e utilizando a recirculação refrigerada dos gases de exaustão (EGR) a 1800 rpm. O objetivo principal da adoção do ciclo Miller foi aumentar a eficiência através do aumento do ciclo de expansão, que pode ser obtido pelo fechamento adiantado ou atrasado da válvula de admissão (IVC). A técnica de turbo alimentação e o *intercooler* são utilizados, frequentemente, para aumentar a densidade do ar admitido e compensar a perda de potência devido ao fechamento adiantado da válvula de admissão. O modelo utilizando o ciclo Miller com IVC foi capaz de aumentar a eficiência líquida indicada de 43,5% para 47%. Com a utilização de até 40% de EGR permitiu a redução na ocorrência de detonação e os autores observaram um aumento na eficiência bruta indicada de 44% para 46,5%.

Martins, Lanzasova e Sari (2015) avaliaram a influência da água na combustão de misturas etanol/água, com índices de hidratações de 5% a 40% com incrementos de 5%. Foi utilizado um motor SI, monocilindro, razão volumétrica de compressão de 12:1, originalmente Diesel, adaptado para o ciclo Otto. A combustão foi ajustada para 50% da massa queimada (MFB) a 10 °CA DPMS, 7bar BMEP e mistura estequiométrica. O modelo 1D de duas zonas foi criado no *GT Power*® para analisar a combustão baseada em dados experimentais. O modelo *Woschini* adaptado foi utilizado para cálculos de transferência de calor e *Chen-Flynn* 19 para fricção. Houve tendência do aumento da eficiência térmica com o aumento da hidratação. Isso ocorre, pois, a eficiência está relacionada com o coeficiente politrópico que é maior para temperaturas mais baixas. Observou-se maior duração da combustão com aumento da hidratação. Essa ocorrência pode ser atribuída a baixas velocidades de propagação da chama. Os valores entre 30-50 °CA foram similares ao etanol anidro e também a gasolina. Observou-se, ainda, que o aumento na hidratação resultou na diminuição da reatividade química, próximo à vela, levando a um atraso na ignição. Assim, baixas temperaturas são alcançadas ocasionando diminuição das emissões de NO_x. Regiões de massa não queimada, com baixas temperaturas, foram encontradas, sendo possível aumentar a razão de compressão, permitindo o *downsizing* devido ao maior limite à detonação. Hidratações até 20% v/v não alteraram significativamente as emissões de CO. Acima de 20% ocorreu um aumento devido à combustão incompleta ou diminuição da reatividade química. O HC e os aldeídos, não foram investigados. A utilização de etanol com altos índices de hidratação mostrou-se possível, apresentando benefícios tanto em emissões de NO_x quanto em desempenho.

Lanzasova, Nora e Zhao (2016) investigaram a operação de um motor monocilindro, SI, injeção direta de combustível, operando com gasolina, etanol anidro e etanol hidratado com índices de hidratação de 5%, 10% e 20% de água (v/v). Utilizaram-se duas condições de carga (IMEP) 3,1 bar e 6,1 bar, injeção de mistura estequiométrica, mistura pobre e rotação constante (1500 rpm). Os efeitos da hidratação do etanol na combustão e emissões foram os parâmetros avaliados. Os autores observaram que o aumento da hidratação, a taxa de liberação de calor, a duração da combustão, a fase inicial de desenvolvimento da chama foi afetada e ocorreu diminuição nos picos de temperatura resultando em redução das emissões

de NO_x. Operando com a gasolina, as emissões de NO_x foram maiores. A excessiva presença de água nas paredes do cilindro reduziu a eficiência da combustão e aumentou as emissões de HC e aldeídos. A injeção direta (DI) de etanol produziu, majoritariamente, HC e aldeídos. As emissões de CO diminuíram proporcionalmente com o empobrecimento da mistura. Os autores também realizaram análise econômica avaliando o custo de produção do ESH diante às condições de operação do motor. Observou-se que, trabalhando com misturas mais pobres e etanol com 10% de hidratação (v/v), uma economia global de energia de 31% foi alcançada, comparando-o com o etanol anidro operando em condições estequiométricas. As tendências mostraram que o menor custo operacional para ESH seria alcançado com hidratação de 12,5% (v/v).

Rahman et al. (2016) realizaram um estudo experimental e numérico dos efeitos do teor de água (de 0% a 40% v/v) nas características de ignição iniciada por laser em chamas de mistura ar-etanol. Para o estudo experimental foi utilizada uma câmara de volume constante a 0,1 Mpa e a injeção de etanol sobre-hidratado a 5 Mpa. Os resultados do estudo revelaram que, tanto a taxa de crescimento da chama quanto as velocidades de propagação aumentaram com o aumento da hidratação até 20% de água (v/v) em etanol, indicando um efeito positivo para adição de água a baixos índices. Ainda, observou-se que o atraso na ignição foi diminuindo com adição de água até 20% (v/v), sendo provável que a presença de água aumenta o processo de ionização e a formação de radicais durante a atuação do laser. Com concentrações de água de 30% (v/v) ou mais, as interações água-etanol tornaram-se mais significativas do que as interações etanol-etanol, mostrando que os efeitos da diluição se tornaram dominantes. A análise numérica utilizando o *software* CHEMKIN-PRO revelaram redução na temperatura adiabática da chama e na velocidade de queima laminar com o aumento da hidratação.

Roso et al. (2016) combinando análise numérica e experimental, avaliaram o consumo de combustível e emissões de um motor originalmente Diesel utilizado para geração térmica de energia elétrica, convertido para operação com etanol. A elaboração do modelo computacional unidimensional foi realizada utilizando o *GT-Power*®. O modelo numérico realiza o cálculo das equações de conservação de massa, de energia e de momentum, sendo possível descrever o comportamento do motor a combustão interna (MCI). O percentual de erro observado entre a simulação

e o experimental foi menor que a incerteza de medição. Os autores relatam que o consumo de combustível de um motor do ciclo Diesel, operando com EHC, é aproximadamente 55% maior. Avaliado em duas cargas 20kW e 50kW, o consumo variou proporcionalmente com a variação da carga. Os resultados da simulação foram em torno de 5% maiores do que os valores experimentais. O motor, operando com etanol, emitiu uma quantidade média de NO_x dez vezes menor quando comparado ao Diesel. Essa redução é devida à diminuição da temperatura na câmara de combustão ao custo do aumento de HC, originados de combustível não vaporizado. O aumento nas emissões de CO é função da diferença na mistura ar-combustível para os dois ciclos. A combustão em motores Diesel ocorre com excessiva quantidade de ar e em motores Otto, estequiométrica ou rica, em regimes de maior potência.

Ulhôa et al. (2016) realizaram três simulações computacionais de um motor do ciclo Otto, quatro cilindros e razão volumétrica de compressão de 12:1. Os autores utilizaram o *software* Ricardo *WAVE* para adaptar o motor aos pré-requisitos de uma competição conhecida como Formula SAE. O primeiro modelo numérico desenvolvido é equivalente ao motor original e foi validado com os dados do fabricante e de estudos anteriores. Após validação, o primeiro modelo gerou um segundo com as adaptações de regulamento da prova, que incluía uma restrição no duto de admissão. O terceiro modelo foi configurado para operar com o etanol hidratado combustível e alterada a razão volumétrica de compressão para 14:1, a fim de compensar a perda de potência gerada pela adaptação da restrição no duto de admissão. Após as simulações do terceiro modelo, os autores observaram que com a substituição da gasolina por etanol hidratado e com o aumento da razão de volumétrica compressão ocorreu um ganho de 6% de potência em relação ao segundo modelo a gasolina, 12:1.

Almeida (2017) avaliou os efeitos da adição de hidrogênio-oxigênio, produzido a bordo por eletrólise da água, em um veículo *flex-fuel*, com injeção indireta PFI de etanol, sobre o consumo de combustível e emissões utilizando o ciclo FTP-75 (percurso médio em via pública mais partida a frio em dinamômetro). Foi utilizado um motor de quatro cilindros, 1L, razão volumétrica de compressão 12,15:1, e um reator para eletrólise com volume de 1,73 dm³ e 20A. Somente foram alterados o ângulo de admissão e a quantidade de combustível injetado. A adição de hidrogênio, durante a partida a frio, possibilitou redução no tempo de injeção em aproximadamente 20% e reduções de HC e CO. Com a adição do hidrogênio, a mistura foi empobrecida em 15% em marcha lenta.

Fagundez et al. (2017) realizaram uma análise numérica entre diferentes correlações de transferência de calor (*Woschni*, *Hohenberg*, *Sitkei* e *Annand*), aplicado ao modelo de combustão de duas zonas. O modelo foi validado com dados experimentais de pressão de um motor SI, mono cilindro, alimentado com etanol anidro (5% água v/v) e sobre-hidratado com índices de hidratação de 10% a 40% de água (v/v) incrementos de 10%. Dentre os modelos de transferência de calor, *Woschni* e *Hohenberg* apresentaram os melhores resultados na estimativa do pico de pressão durante a combustão, porém, *Hohenberg* obteve maior precisão, quando comparado com os resultados experimentais. Os modelos *Sitkei* e *Annand* obtiveram valores altos sobre-estimando os valores de pressão. A temperatura máxima foi similar entre os modelos apresentando redução com o aumento da hidratação. O fluxo de calor apresentou leve redução mas permaneceu razoavelmente constante. Os resultados de desempenho, para todas as misturas testadas, foram muito próximos, tanto simulados quanto experimentais, indicando que etanol sobre-hidratado é uma opção para substituição ao anidro. Outra vantagem observada foi o baixo custo computacional quando se utiliza modelagem termodinâmica comparado a modelos mais complexos.

Fagundez et al. (2017) realizaram um estudo experimental para determinar a melhor composição de etanol sobre hidratado, como combustível, para um motor SI. Um novo método, NEF (*Net Energy Factor*) é proposto para o cálculo de eficiência energética de ESH em relação ao EHC. O processo de destilação por batelada foi utilizado para produzir o EHC, quatro composições de ESH com índices de hidratação de 10% a 40% de água (v/v), incrementos de 10% e também determinar a quantidade de energia necessária para obtenção de cada composição. Os parâmetros de desempenho do motor SI, operando com as misturas produzidas, foram usados para cálculo da eficiência de conversão do combustível. No processo de destilação, a quantidade de energia necessária para produzir E60W40 até E90W10 é acrescida linearmente com a redução da hidratação. A partir da composição E90W10 até o EHC, o aumento na energia tem característica exponencial. Os resultados experimentais mostraram desempenho similar em todos os níveis de hidratação e apenas um decréscimo no pico de pressão com aumento da hidratação foi observado. Para avaliação da eficiência de conversão do combustível e do consumo específico de combustível, o torque (37 N.m), energia gerada (6,97 kW) e a rotação (1800 rpm), foram mantidos constantes para todos os níveis de hidratação. O consumo específico

de combustível aumentou com o aumento da hidratação devido à redução do PCI. Para o valor do NEF, eficiência entre a energia consumida para produção do combustível e a energia produzida na combustão, é vantajosa a utilização de etanol com maiores níveis de hidratação quando comparado ao EHC. O E70W30 apresentou a melhor eficiência.

Noh e Soo-Young (2017) apresentaram uma revisão sobre os efeitos do bioetanol em motores CI de processos de combustão avançados, os designados HCCI (Ignição por Compressão de Carga Homogênea), PPC (Combustão Parcialmente Pré-misturada), GCI (Gasolina de Ignição por Compressão) e combustão por difusão. Em todos os modelos “avançados” de combustão, as emissões de NO_x e fuligem foram menores que às observadas nos motores CI convencionais. Porém, as emissões de HC e CO continuam sendo o grande desafio para motores CI e também os CI de combustão “avançadas”, alimentados com bioetanol.

Sari (2017) avaliou a utilização de etanol sobre-hidratado (10%, 20% e 30% de água v/v) alimentando um motor monocilindro de testes, PFI, com ignição por centelha. Na sequência, variou-se a razão volumétrica de compressão para avaliar as características antidetonantes com a presença da água e utilizando a análise numérica (Chem-1D), também em função dos teores de água, onde foram avaliadas a velocidade e a temperatura adiabática em chama livre unidimensional. O autor concluiu que a presença de água afeta negativamente os parâmetros de desempenho ocorrendo diminuição nas emissões de NO_x, CO e aumento nas emissões de HC. Por suas características antidetonantes a presença da água permite a operação com maiores razões volumétricas de compressão e sobre alimentação, deslocando os pontos de máxima eficiência na direção das misturas com maiores percentuais de água. O valor máximo obtido foi de 41% para 14,5:1 e mistura E80W20. Com a mistura E70W30 foi possível operação em condição de máximo torque na razão volumétrica de compressão 14,5:1, provando que é possível encontrar maiores valores de eficiência com o aumento da razão volumétrica de compressão.

Da Costa et al. (2018) realizaram um estudo experimental da combustão pobre do etanol hidratado combustível. Foi utilizado um motor SCORE (*Single Cylinder Optical Research Engine*), EDI (Injeção Direta de Etanol) a 100 bar, carga constante de 3 bar NIMEP (*Net Indicated Mean Effective Pressure*), 1000 rpm e a razão de equivalência estequiométrica ar/combustível variando de $\lambda=1,0$ até o limite mínimo de queima (*lean burn limit*), em intervalos de 0,05. Foram avaliados a eficiência de

conversão de combustível, características da combustão e emissões para cada λ . Para λ acima de 1,5 ocorreram queimas parciais e falhas na combustão. Para condição estequiométrica ($\lambda=1,0$), injeções estratificadas atrasadas provocaram instabilidade na combustão. O limite da razão de equivalência estequiométrica ar/combustível do etanol hidratado combustível encontrada foi de $\lambda=1,4$. Reduções nas emissões de NO_x foram obtidas com as misturas mais pobres, reduções de HC e CO com variações até $\lambda=1,4$.

Sari et al. (2018) realizaram avaliação experimental para verificar os efeitos de hidratação e de razões volumétricas de compressão (12,5:1, 13,5:1 e 14,5:1) no desempenho, na combustão, no limite de detonação e nas emissões em um motor SI, mono cilindro, PFI, alimentado com EHC e ESH com hidratações de 10%, 20% e 30% de água (v/v). O ponto de ignição foi ajustado para o MBT e observou-se que, em geral, maiores concentrações de água resultam em maiores avanços de ignição e, maiores razões de compressão, combustões mais rápidas. Com o aumento da razão de compressão volumétrica, a taxa de liberação de calor aumenta, mas o ganho de energia não é proporcional. Esse fato pode ser causado por maiores perdas de calor através das fendas (aberturas construtivas) que aparecem com aumento de relação entre a superfície de combustão e o volume. O melhor resultado com aumento da razão volumétrica de compressão (14,5:1) foi obtido operando com E80W20 e a eficiência indicada chegou a 41%, valor é quase 20% maior que os valores obtidos com a razão de 12,5:1. Esse fato é consequência da combinação de eficiência (de combustão) e ajuste do início da combustão. Em comparação com o EHC (4% água v/v), o aumento foi de 7% na eficiência indicada. O aumento da razão de compressão volumétrica aumenta a pressão no cilindro e o aumento da concentração de água resulta em absorção de calor, mantendo as emissões de NO_x no mesmo nível, devido ao balanço observado entre a razão volumétrica de compressão e da hidratação.

2.1.1 Estado da arte

Com base na bibliografia estudada, a Tabela 2 apresenta o resumo do estado da arte referente ao uso do etanol hidratado e sobre-hidratado em motores a ignição por compressão e ignição por centelha.

A revisão bibliográfica mostrou grande interesse dos autores em utilizar o etanol sobre-hidratado em substituição ao óleo diesel em função do alto número de octanas

do combustível o que lhe confere maior resistência à detonação e além de ser um combustível renovável proporcionou redução nas emissões de NO_x.

Tabela 2 - Resumo do estado da arte em relação ao consumo específico de combustível e eficiência térmica utilizando EHC e ESH

Parâmetros de Eficiência	
Térmica	Autores
Aumento	Brusstar et al. (2002); Costa e Sodr� (2010); Costa e Sodr� (2011); Brito Jr. et al. (2013); Balki, Sayin e Canakci (2014); Martins, Lanzasova e Sari (2015); Fagundes et al. (2017).
Redu�o	Saxena et al. (2012); Zhu et al. (2013); Sari (2017); Munsin et al. (2013); Sari (2017).
Consumo Espec�fico de Combust�vel	
Aumento	Brusstar et al. (2002); Costa e Sodr� (2010); Ambr�s (2013); Munsin et al. (2013); Balki, Sayin e Canakci (2014); Fagundes et al. (2017); Sari (2017); Fagundes et al. (2017).
Redu�o	Bruto Jr. et al. (2013).

Fonte: Elaborado pelo autor

No resumo do estado da arte, referente a utiliza o do EHC e ESH, foi observado, majoritariamente, a melhora na efici ncia t rmica e aumento no consumo espec fico de combust vel, esse aumento pressup e redu o na efici ncia de convers o do combust vel em fun o da redu o do PCI com a hidrata o

Al m dos par metros avaliados algumas conclus es s o relevantes para este estudo, como a presen a da  gua ocasiona atraso de igni o (Mack, Aceves e Dibble, 2009). O consumo de EHC   55% maior que o consumo do  leo diesel (Roso et al., 2016) e, em substitui o a gasolina,   vi vel quando seu custo   no m ximo 72% o custo da gasolina (Costa e Sodr , 2010).

O EHC apresentou melhores resultados de desempenho em maiores rotações (Costa e Sodr , 2011; Balki, Sayin e Canakci, 2014) e o E70W30 (Ambr s 2013; Saxena et al., 2014; Ambr s et al., 2015; Fagundes et al., 2017; Sari, 2017) obteve os melhores resultados de desempenho.

O limite da raz o de equival ncia estequiom trica A/F, encontrado, onde n o ocorreu falhas no processo de combust o   para λ igual ou inferior a 1,4.

Com o aumento da raz o volum trica de compress o observou-se aumento na press o interna do cilindro, no trabalho realizado pelo pist o, no torque e no BMEP, com diminui o no SFC (Costa e Sodr , 2011). Para a hidrata o de 15% (v/v) obteve-se consumo de energia para produ o do ESH quatro vezes menor (Bilh o; 2015) e para 12,5% de hidrata o (v/v), o custo operacional   31% menor (Lanzanova, Nora e Zh o; 2016).

Dos trabalhos que utilizaram a an lise num rica, Ambr s (2013) obteve diferen a de at  20% entre os dados experimentais e simulados, Ambr s et al. (2015) menores que 13%, ambos utilizando o *Matlab* e Roso et al. (2016) obteve dados simulados 5% maiores que os experimentais utilizando o *GT Power*.

Na Tabela 3   apresentado o resumo do estado da arte para as emiss es, onde destacou-se a tend ncia na redu o das emiss es de NO_x com o aumento da hidrata o.

Tabela 3 - Resumo do estado da arte em rela o as emiss es de CO, HC, NO_x utilizando EHC e ESH

Poluente	Autores
NO_x	
Redu�o	Brusstar et al. (2002); Mack, Aceves e Dibble (2009); Saxena et al. (2012); Breaux e Ancharya (2013); Munsin et al. (2013); Balki, Sayin e Canakci (2014); Saxena et al. (2014); Martins, Lanzanova e Sari (2015); Roso et al. (2016); Noh e Soo-Young (2017); Sari (2017); Da Costa et al. (2018);
Aumento	Costa e Sodr� (2010);
CO	

Aumento	Mack, Aceves e Dibble (2009); Munsin et al. (2013); Saxena et al. (2014); Martins, Lanzanova e Sari (2015); Martins, Lanzanova e Sari (2015); Lanzanova, Nora e Zhao (2016); Roso et al. (2016); Noh e Soo-Young (2017);
Redução	Costa e Sodré (2010); Balki, Sayin e Canakci (2014); Sari (2017); Da Costa et al. (2018);
HC	
Aumento	Mack, Aceves e Dibble (2009); Munsin et al. (2013); Saxena et al. (2014); Lanzanova, Nora e Zhao (2016); Roso et al. (2016); Noh e Soo-Young (2017); Sari (2017);
Redução	Costa e Sodré (2010); Sementa, Vanglieco e Catapano (2012); Balki, Sayin e Canakci (2014); Da Costa et al. (2018);

Fonte: Elaborado pelo autor

2.2 Trabalhos realizados no CPMEC

As simulações deste estudo foram realizadas no CPMEC (Centro de Pesquisa em Motores, Emissões e Combustíveis) da PUC Minas, onde outros trabalhos envolvendo o mesmo motor foram realizadas. Tratando-se de um trabalho numérico utilizou-se como base de dados desses trabalhos que são revisados cronologicamente neste item.

O primeiro trabalho com o motor MWM D229-4, ciclo Diesel, 4 cilindros em linha, cilindrada total de $3,992 \times 10^{-3} \text{ m}^3$, normalmente aspirado e razão volumétrica de compressão de 17:1, foi realizado por Valente (2007). Um trabalho experimental que manteve as configurações originais do motor: ciclo Diesel, normalmente aspirado, acionando um gerador de energia elétrica, alimentado com óleo diesel mineral e biodiesel em diferentes bases e concentrações. O autor observou o aumento do consumo de combustível com o aumento do percentual de biodiesel e diminuição nas emissões de NO_x . Este foi o primeiro trabalho do CPMEC envolvendo o estudo da utilização de um biocombustível em substituição parcial e a análise de emissões. Todos os trabalhos apresentados nesta revisão envolvem a avaliação dos efeitos da

substituição, parcial ou total, do óleo diesel por fontes alternativas, renováveis em sua maioria, com o mesmo motor.

Hauck (2010) desenvolveu um modelo computacional, zero dimensional, utilizando a linguagem C++ para simulação do motor. A análise termodinâmica dos gases, no interior do cilindro, foi utilizada para determinar a: pressão, temperatura, calor transferido às paredes, calor fornecido pelo combustível, variação da energia interna e entalpia. A partir da determinação destas variáveis foi possível conhecer os parâmetros de desempenho do motor como: torque potência, pressão média efetiva, consumo específico de combustível e eficiência térmica. O modelo desenvolvido considerou a fase fechada do ciclo, que consiste nos processos de compressão, combustão, expansão e a fase aberta, que consiste nos processos de exaustão e admissão. O autor comparou a potência indicada calculada pelo modelo com a fornecida pelo fabricante e concluiu que os valores obtidos por seu modelo foram satisfatórios não informando, com detalhes, a diferença entre esses dados. Como modelo verificou-se a ocorrência de escoamento subsônico durante a fase aberta do ciclo.

Almeida (2012) realizou um estudo numérico utilizando o *AVL Boost®* para avaliar as emissões e desempenho do motor operando com óleo diesel e hidrogênio. Na simulação, a carga foi variada de 0 kW a 40 kW e razões de substituição energética de hidrogênio/óleo diesel de 0%, 5%, 10%, 15% e 20%. Foi observado que com o aumento da fração de hidrogênio, ocorreram reduções no consumo específico de combustível, nas emissões de CO, NO_x e de material particulado (MP), principalmente para as cargas mais altas.

Justino (2012) realizou uma análise experimental de desempenho do grupo motor-gerador, alimentando-o com óleo diesel e 5% de biodiesel (B5), no modo bicomcombustível, B5/gás natural e B5/hidrogênio. Foi comparado o consumo do motor em sua configuração original e variando a carga de 0 kW a 30 kW. Observou-se que, com a adição tanto de hidrogênio quanto de gás natural ocorre a diminuição de forma não linear do consumo de B5, porém com o hidrogênio ocorreu uma redução maior da temperatura dos gases de exaustão.

Mendes (2012) analisou, experimentalmente, o desempenho e emissões do motor operando com óleo diesel e hidrogênio. O hidrogênio produzido por eletrólise da água não foi armazenado sendo direcionado diretamente para o coletor de admissão. O objetivo do autor foi caracterizar o gerador de hidrogênio avaliando a

vazão volumétrica do gás em função da corrente elétrica do sistema e concluiu que a adição de hidrogênio em baixas vazões não apresentou reduções significativas de consumo e emissões. O autor relatou que na rotação de 1800 rpm e atraso de ignição de 33° CA, depois do ponto morto superior, não são condições favoráveis para a adição de hidrogênio.

Morais (2012) realizou uma análise experimental deste grupo motor-gerador operando com óleo diesel e hidrogênio sem alterar suas características. O motor foi alimentado no modo bicomcombustível, com injeção indireta de hidrogênio em percentuais de substituição do óleo diesel por hidrogênio de 0%, 5%, 10%, 15% e 20%. O autor observou que a substituição parcial do óleo diesel por hidrogênio ocasionou aumento da eficiência térmica, redução no consumo de combustível e na emissão de CO₂.

Euzébio (2013) realizou uma simulação através de modelo computacional termo hidráulico de troca térmica para um trocador de calor, compacto, tipo Louver, em regime estacionário, aplicado a este motor-gerador e utilizou o software EES (*Engineering Equation Solver*). Em avaliação dos resultados, o autor observou que o modelo reproduziu parcialmente o comportamento do trocador de calor, sendo adequado para reprodução do comportamento de faixa de vazão mássica de líquido de arrefecimento de 1,5 kg/s a 2,4 kg/s e vazão mássica de ar de 0,4 kg/s a 1,8 kg/s. A variação da temperatura do ar de entrada, parâmetros geométricos, vazão mássica de ar e do fluido de arrefecimento alteram a taxa de transferência de calor.

Oliveira (2015) realizou um estudo experimental no mesmo grupo motor-gerador utilizando diferentes técnicas de injeção de etanol no modo bicomcombustível, operando com óleo diesel e 7% de biodiesel (B7). Duas foram as técnicas utilizadas: misturas de etanol anidro (5%, 10% e 15%) em óleo diesel (B7) injetadas diretamente na câmara de combustão e injeção indireta de etanol hidratado no coletor de admissão em percentuais de 5%, 10%, 15%, 20%, 25% e 30%. O autor observou, em comparação com o óleo diesel padrão (B7), aumento na pressão no interior do cilindro e da taxa líquida de liberação de calor com o etanol, principalmente em cargas altas. Ao etanol foram atribuídos o aumento da eficiência térmica com a injeção indireta e a redução nas emissões de dióxido de carbono.

Brito (2016) analisou o perfil de temperaturas dos gases resultantes da combustão no duto de exaustão do grupo motor-gerador operando com cargas entre 0kW e 37,5kW. No trabalho foram utilizados três métodos: diferenças finitas (FDM) para determinar o perfil da temperatura e resolução da equação da energia, método

dos volumes finitos (FVM) utilizando o ANSYS CFX® para simular o comportamento do gás e obtenção das equações do escoamento turbulento e o trabalho experimental, que utilizou oito termopares tipo “K” ao longo de 1500 mm do duto de exaustão de 80 mm de diâmetro. Segundo o autor, os resultados experimentais e numéricos mostraram tendência do aumento do gradiente de temperaturas com aumento das cargas no motor. Apesar dos resultados numéricos apresentarem perfil de temperatura similar ao experimental o modelo FDM subestimou a transferência de calor ao longo do duto de exaustão.

Morais (2016) realizou experimentalmente a conversão reversível do grupo motor-gerador do ciclo Diesel para o ciclo Otto, alimentado com etanol hidratado e mantendo a mesma razão volumétrica de compressão. O autor realizou a análise de desempenho e emissões para avaliar a utilização de um combustível renovável em substituição completa de um fóssil e observou aumento na eficiência para a carga de 37,5kW e emissões de hidrocarbonetos com valores próximos, quando comparados com o motor operando no ciclo Diesel. O autor observou que com o aumento do índice de hidratação do etanol ocorreu redução da pressão máxima na câmara de combustão e também redução nas emissões de NO_x, CO e CO₂.

Silva (2016) realizou a avaliação de parâmetros da combustão a partir da medição da pressão no cilindro. Aplicaram-se quatro métodos: pressão absoluta de referência no coletor de admissão, dois pontos de referência (2ptR), três pontos de referência (3ptR), mínimos quadrados de Monte Carlo (LSM) e mínimos quadrados modificados para obter a referência da pressão no cilindro. O autor observou que as curvas de pressão na câmara de combustão aumentam com a aplicação de carga e as pressões máximas para os métodos 2ptR, 3ptR e LSM foram em média 98.8% em relação ao método mínimos quadrados modificados para a carga de 0kW e 99,4% para a carga de 37,5kW. Considerando a pequena diferença entre os métodos o autor concluiu que estes métodos se equivalem.

Justino (2017) desenvolveu um sistema de controle que permitiu o motor, originalmente do ciclo Diesel, operar no ciclo Otto sem alterar a razão volumétrica de compressão com a comutação entre ciclos ocorrendo de forma dinâmica. Experimentalmente comparou-se o consumo, desempenho e emissões utilizando óleo diesel, contendo 8% de biodiesel (B8) operando no ciclo Diesel, Etanol Hidratado Combustível, após conversão, operando no ciclo Otto. Observou-se que em cargas

mais altas as taxas de liberação de calor, no ciclo Otto, foram mais altas que às do ciclo Diesel e emissões de CO e HC foram próximas.

Oliveira (2018) avaliou os efeitos do momento de injeção direta, em sistemas separados, de etanol e óleo diesel com 8% de biodiesel (B8) e utilizando um sistema de recirculação dos gases de exaustão (EGR) no consumo e emissões. A carga foi variada de 5 kW a 37,5 kW, injeção de etanol entre 150° CA e 0° CA antes do ponto morto superior. Percentuais de substituição do B8 por etanol entre 20% e 75% e 10% de razão de EGR. O autor observou manutenção ou aumento da eficiência de conversão de combustível utilizando o etanol em cargas altas e redução em cargas baixas. Combinando a injeção de 60% de etanol a 40° CA antes do ponto morto superior e EGR possibilitou menores emissões de HC e NO_x. A injeção direta de etanol permitiu maiores percentuais de substituição do B8 quando comparado com técnicas de injeção indireta.

Souza (2018) avaliou o desempenho e emissões do grupo motor-gerador, operando no modo bicomcombustível, com injeção direta de etanol e óleo diesel, em sistemas de injeções separados. Para a análise do estudo variaram-se a carga entre 15 kW e 37,5 kW, injeção de etanol a 40° CA antes do ponto morto superior (APMS) e injeção de diesel a 23° CA APMS. O óleo diesel foi substituído por etanol em percentuais de massa entre 52% e 59% e variou-se o índice de hidratação do etanol de 7% a 30%. O autor observou que com o aumento da hidratação do etanol ocorreram atrasos de ignição variando com a carga aplicada, e aumento da pressão no cilindro com cargas mais altas. A técnica favoreceu a redução das emissões de gases poluentes.

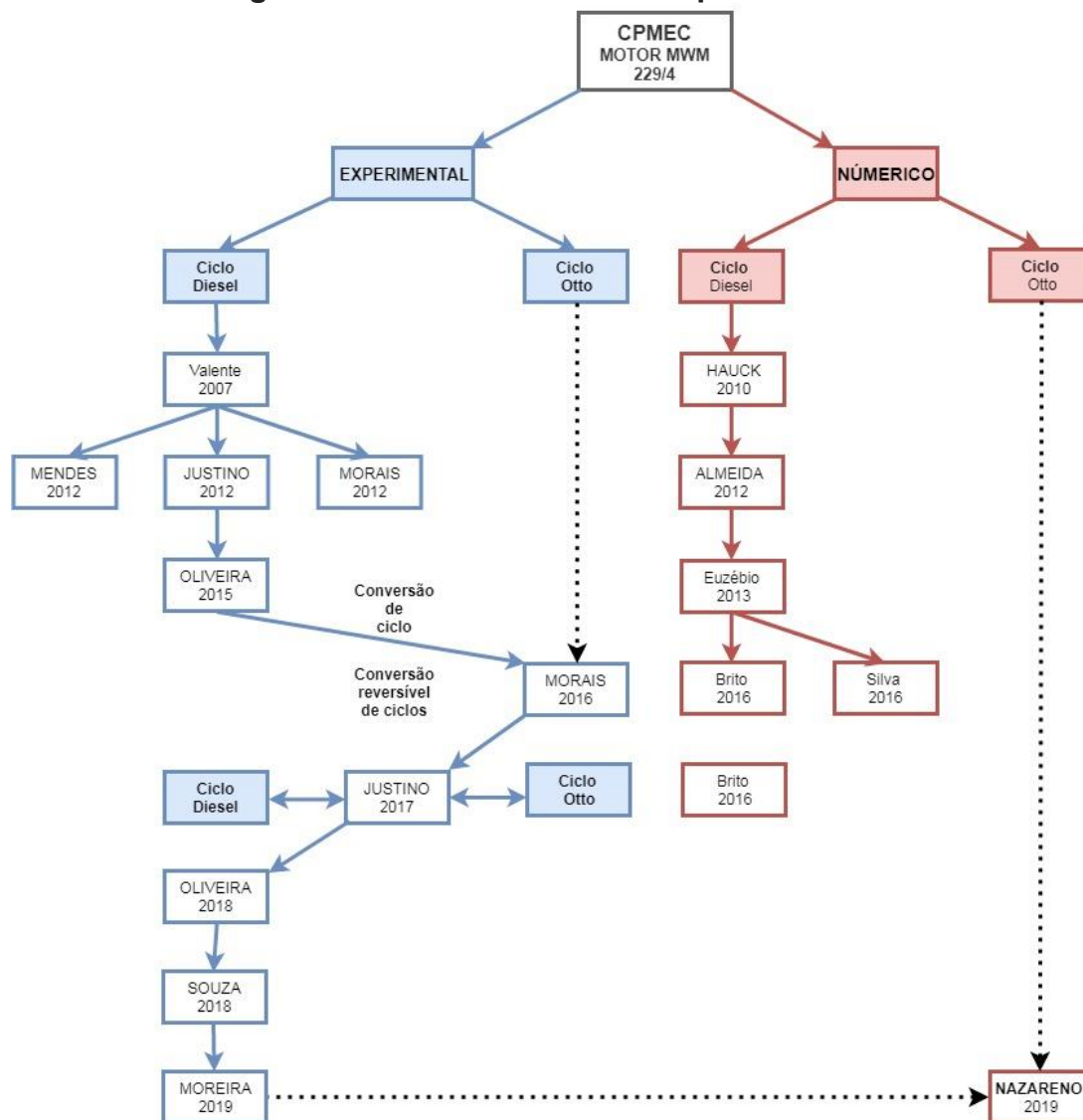
Moreira (2018) avaliou o desempenho e emissões do grupo motor-gerador, convertido para operação no ciclo Otto, sem alterar a razão volumétrica de compressão de 17:1 e alimentado com EHC e ESH variando o índice de hidratação de 17% a 47% de água (v/v). A carga foi variada de 0 kW a 37,5 kW. Os ângulos de ignição foram ajustados a fim de evitar a ocorrência do efeito de detonação. O autor observou a manutenção na eficiência de conversão do combustível para as alimentações propostas e estabilidade no funcionamento do motor, permitindo trabalhar com maiores razões volumétricas de compressão e baixos teores alcoólicos.

Os dados experimentais de Moreira (2018) serão utilizados para validação do modelo numérico e avaliação proposta pelo autor de trabalhar com maiores razões

volumétricas de compressão visando melhorar a eficiência na conversão do combustível e comportamento das emissões.

Os trabalhos realizados pelo CPMEC são apresentados cronologicamente na Figura 4. Dos trabalhos que contribuíram para este estudo, o primeiro foi realizado por Moraes (2016) que efetuou a conversão do motor, originalmente do ciclo Diesel para operar no ciclo Otto mantendo suas características originais. Moreira (2018) realizou uma avaliação experimental do motor, convertido para operar no ciclo Otto, com EHC e ESH com percentuais de hidratação de 7% a 47%, sem alterar a razão volumétrica de compressão.

Figura 4 - Trabalhos realizados pelo CPMEC



Fonte: Elaborado pelo autor

3 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Neste capítulo são descritos os principais conceitos, de acordo com a literatura atual, com o objetivo de explicitar de forma clara o embasamento teórico que compõe esse trabalho.

3.1 Motores a combustão interna

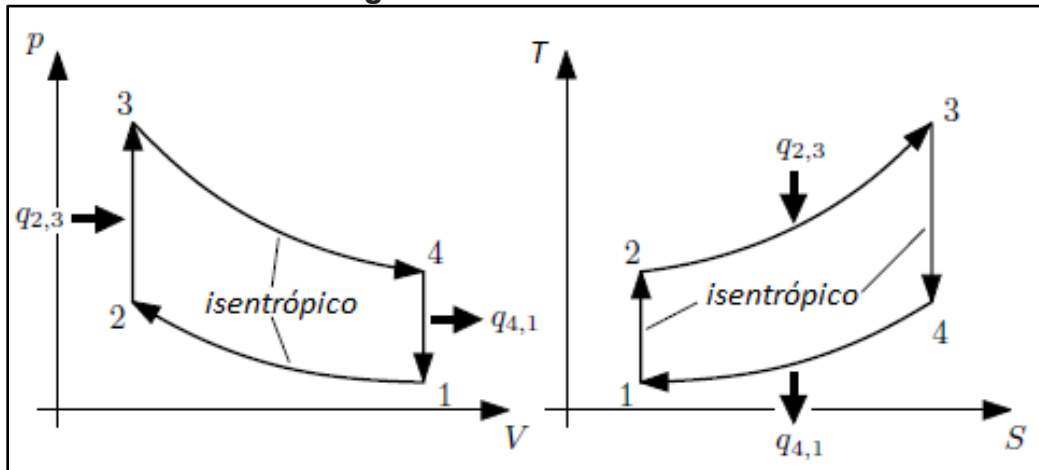
Motores a combustão interna são máquinas térmicas alternativas com o propósito de realizar trabalho através da transferência da energia contida no combustível para o seu eixo. Energia que é liberada em forma de calor, através da queima ou oxidação do combustível. Nem toda energia térmica liberada é convertida em energia mecânica, parte dessa energia é dissipada através dos gases de exaustão expelidos em temperaturas acima às de admissão, na transferência de calor dos gases da combustão para as paredes do cilindro e no sistema de arrefecimento. Sua origem remonta a 1876, quando Nicolaus Otto desenvolveu o primeiro motor a ignição por centelha (SI) e em 1892, quando Rudolf Diesel criou o motor à ignição por compressão (CI). Estima-se que dois bilhões destes motores estejam em uso atualmente (HEYWOOD, 2018).

Nos motores de ignição por centelha a combustão é iniciada por uma vela de ignição, relativamente leves e de baixo custo, indicados para aplicação automotiva com potências de até 225kW. Já os motores de ignição por compressão o ar é comprimido até atingir pressão e temperatura suficientes para que a combustão se inicie de maneira espontânea, assim que o combustível é injetado. Indicado para maiores potências com menor consumo de combustível (MORAN e SHAPIRO, 2006).

3.1.1 Ciclo Otto

No ciclo Otto ideal assume-se que a adição de calor ocorre de maneira instantânea, a volume constante, quando o pistão está no ponto morto superior (PMS) (MORAN e SHAPIRO, 2006). O ciclo é apresentado na Figura 5 pelos diagramas p - V e T - S .

Figura 5 - Ciclo Otto Ideal



Fonte: adaptado de Justino (2018)

O ciclo consiste em quatro processos internos reversíveis em série:

- 1-2 compressão isentrópica;
- 2-3 transferência de calor a volume constante de uma fonte externa;
- 3-4 expansão isentrópica (curso de potência);
- 4-1 rejeição do calor a volume constante.

Onde:

- p Pressão [kPa];
 V Volume [m^3];
 T Temperatura [K];
 S Entropia [kJ/(kg.K)];
 $q_{2,3}$ Energia térmica da combustão [kJ];
 $q_{4,1}$ Energia térmica da exaustão [kJ].

A razão volumétrica de compressão é dada pela Equação 1:

$$r = \frac{v_1}{v_2} \quad (1)$$

Onde:

r Razão volumétrica de compressão [-];

v_1 Volume do cilindro [m³];

v_2 Volume da câmara de combustão [m³].

A eficiência térmica do ciclo Otto é obtida pela Equação 2:

$$\eta_{t_{Otto}} = 1 - \frac{1}{r^{k-1}} \quad (2)$$

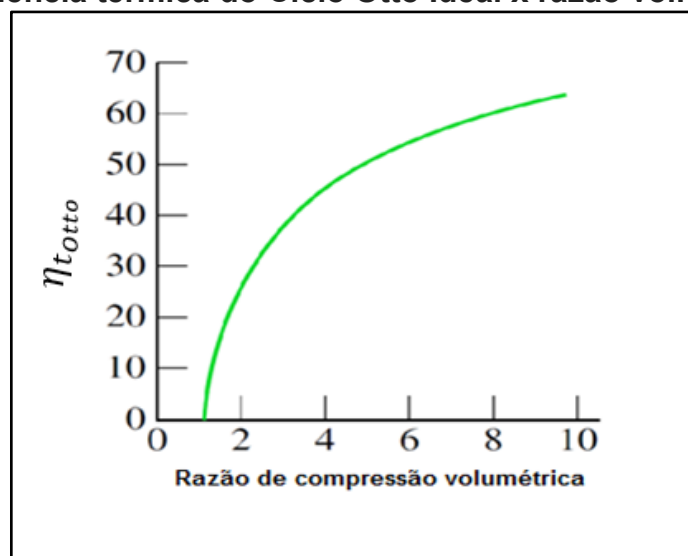
Onde:

$\eta_{t_{Otto}}$ Eficiência térmica do ciclo Otto [Adimensional];

k Coeficiente politrópico [Adimensional].

A Equação 2 indica que a eficiência térmica no ciclo Otto é função da razão volumétrica de compressão e da constante “ k ”. A Figura 6 apresenta a relação entre a eficiência e a razão de compressão para $k = 1,4$, valor da constante para o ar em condições ambiente de temperatura e pressão.

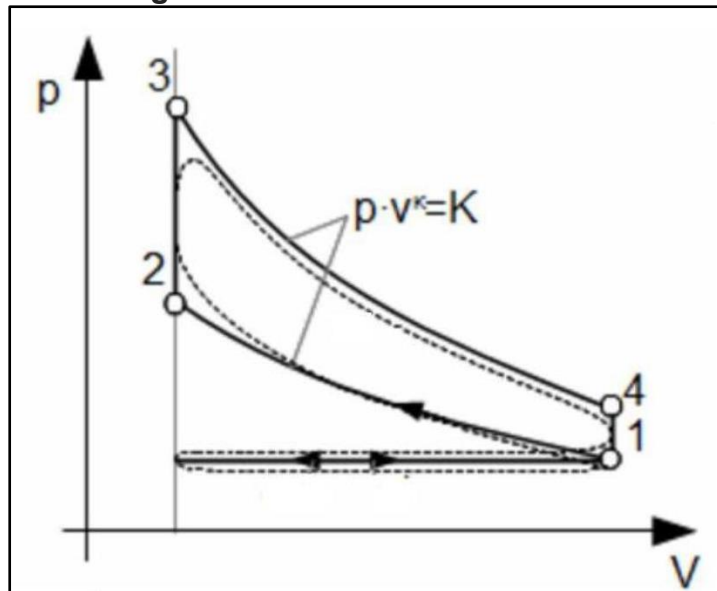
Figura 6 - Eficiência térmica do Ciclo Otto Ideal x razão vol. de compressão



Fonte: Adaptado de Moran e Shapiro (2006)

Devido aos processos irreversíveis, não adiabáticos de expansão, compressão e combustão, o ciclo real tem comportamento diferente do ideal, Figura 7.

Figura 7 - Ciclo Otto Ideal X Real



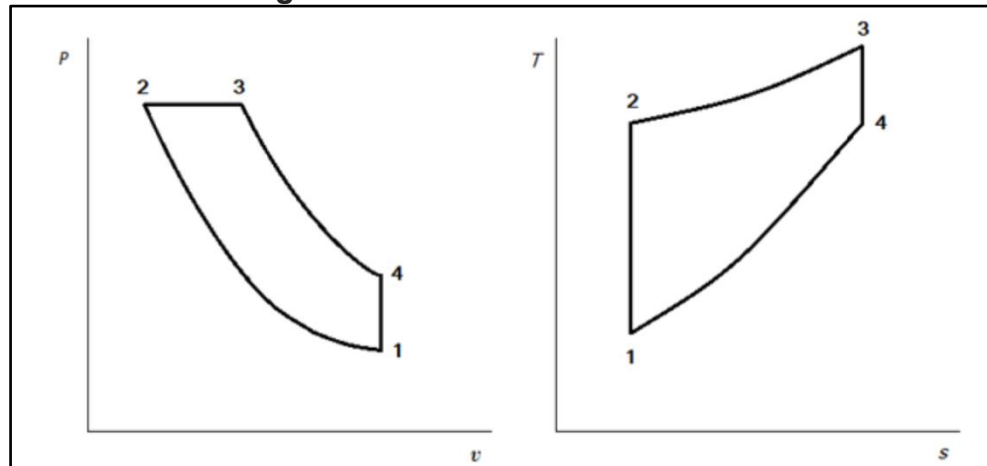
Fonte: Adaptado de Skorpik (2016)

A área tracejada da Figura 7 representa o ciclo Otto real, onde a energia fornecida pela combustão ocorre em processo reversível, assim, uma quantidade desta energia é despendida nos processos de bombeamento (exaustão e admissão).

3.1.2 Ciclo Diesel

No ciclo Diesel ideal, a adição de calor ocorre de maneira instantânea, à pressão constante e inicia quando o pistão está no ponto morto superior (PMS). Os demais processos ocorrem como no ciclo Otto (MORAN e SHAPIRO, 2006). O ciclo Diesel ideal é apresentado na Figura 8 pelos diagramas p - V e T - S .

Figura 8 - Ciclo Ideal Diesel



Fonte: Moran e Shapiro (2006)

Como no ciclo Otto, a eficiência térmica é também função da razão volumétrica de compressão e dado pela Equação 3 (MORAN e SHAPIRO, 2006):

$$\eta_{t_{Diesel}} = 1 - \frac{1}{r^{k-1}} \left[\frac{R_c^k - 1}{k(R_c - 1)} \right] \quad (k = \text{constante}) \quad (3)$$

Onde:

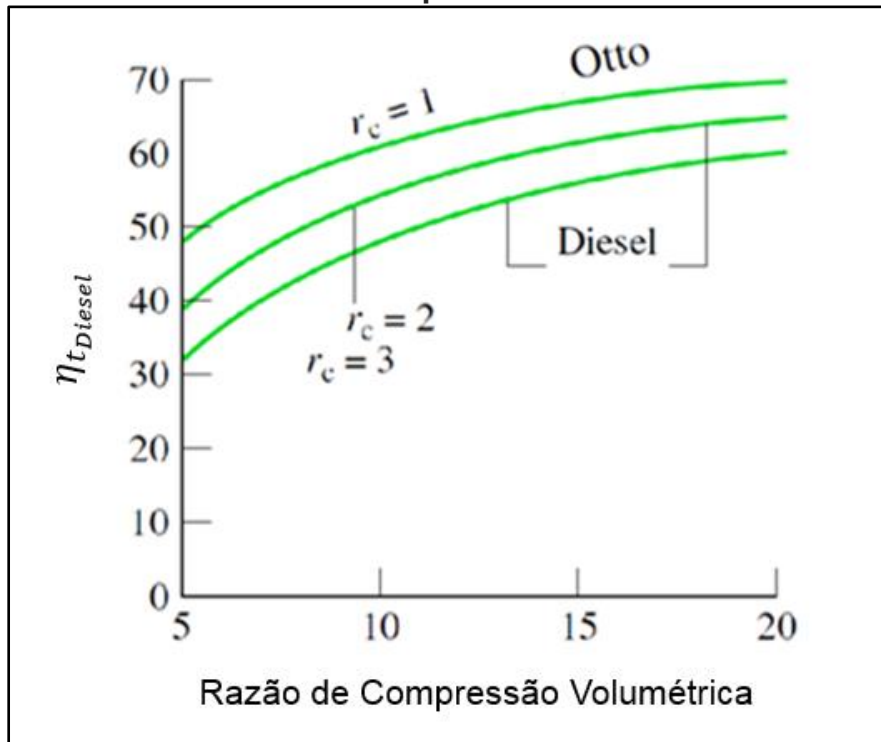
$\eta_{t_{Diesel}}$ Eficiência térmica do ciclo Diesel [Adimensional];

R_c Razão de corte [Adimensional].

O termo R_c é a razão entre o volume inicial v_2 e o volume final v_3 , observado na Figura 7 e que corresponde ao intervalo isobárico onde ocorre à entrada de energia no ciclo.

A equação de eficiência do ciclo Diesel (3) difere da equação de eficiência do ciclo Otto (2) somente pelos termos entre colchetes e tem $R_c > 1$. Para $R_c = 1$, o volume final e inicial são iguais o que remete ao ciclo Otto. A Figura 9 apresenta a relação entre aumento da eficiência térmica com a razão volumétrica de compressão.

Figura 9 - Eficiência térmica do Ciclo Diesel Ideal x razão volumétrica de compressão



Fonte: Adaptado de Moran e Shapiro (2006)

3.2 Parâmetros de desempenho

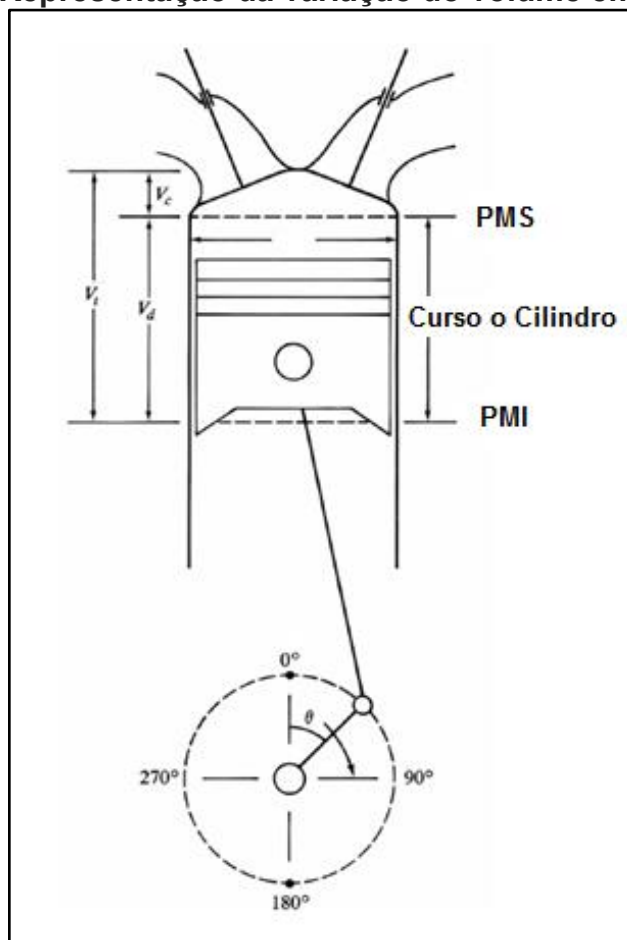
Alguns parâmetros servem de referência para avaliação de motores quanto ao atendimento a requisitos ambientais e de desempenho. Estes parâmetros possibilitam a comparação entre motores de diferentes geometrias e características.

3.2.1 Razão volumétrica de compressão

É a razão entre o volume máximo e o volume mínimo do cilindro, expressa por um valor adimensional, obtido pela equação 4 e representado na Figura 10.

$$r = \frac{v_d + v_c}{v_c} \quad (4)$$

Figura 10 - Representação da variação do volume em um cilindro



Fonte: Adaptado de Heywood (2018)

Onde:

v_d Volume deslocado [m^3];

v_c Volume da câmara de combustão [m^3].

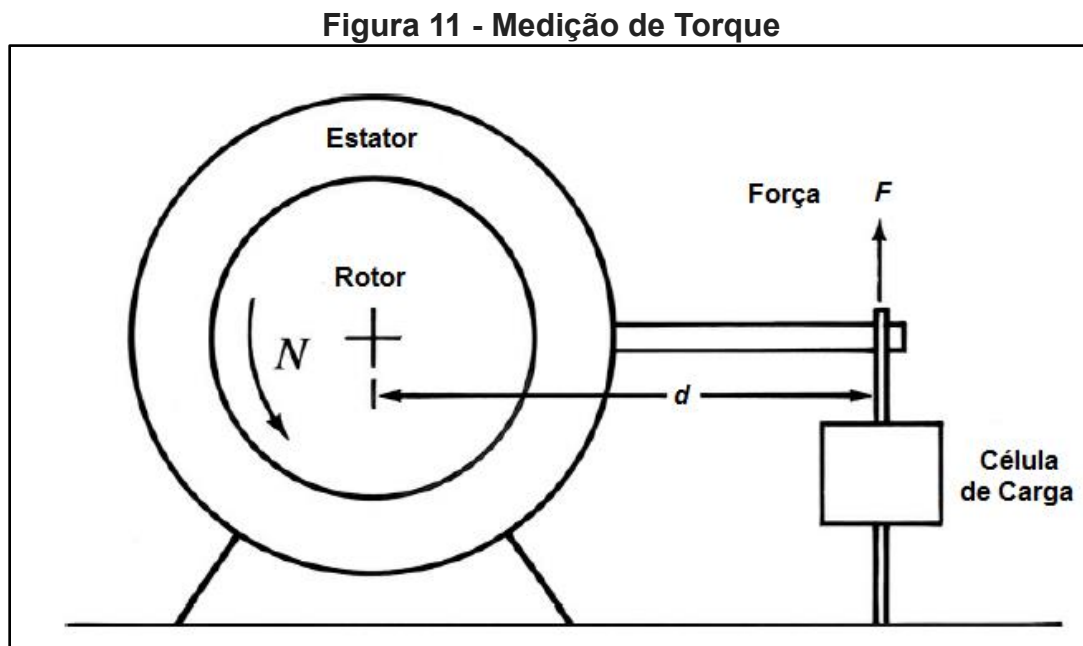
O menor volume do cilindro (V_c) é o volume da câmara de combustão, V_t , o volume total e V_d o volume deslocado durante o movimento do pistão entre PMI e PMS. Os valores típicos de r , para motores de ignição por centelha, variam de 8 a 12 e, ignição por compressão de 14 a 22 (HEYWOOD, 2018).

3.2.2 Torque

O torque desenvolvido por um motor multi-cilindro é a média temporal do torque de cada cilindro. Medido por dinamômetro acoplado ao motor de acordo com a Figura

11. O torque é dado pelo produto da força pela distância do ponto de aplicação de acordo com a Equação 5 (HEYWOOD, 2018):

$$T = F \cdot d \quad (5)$$



Fonte: Adaptado de Heywood (2018)

Onde:

T Torque [Nm];

F Força [N];

d Distância do ponto de aplicação [m].

3.2.3 Potência

A potência produzida pelo motor é o produto do torque pela velocidade angular, dada pela Equação 6 (HEYWOOD 2018).

$$P = 2 \cdot \pi \cdot \omega \cdot T \quad (6)$$

Sendo o torque a medida da capacidade de realizar trabalho, a potência é a taxa com a qual esse trabalho é realizado.

Onde:

- P Potência disponível no eixo [kW];
 ω Rotação do virabrequim [rad/s];

3.2.4 Pressão média indicada (IMEP)

Nos motores a combustão interna, o trabalho é realizado pelas variações da pressão e volume dos gases dentro do cilindro. Os dados de pressão podem ser usados para o cálculo do trabalho transferido dos gases para o pistão.

O trabalho indicado por ciclo ($W_{c,i}$) é obtido pela integração das áreas “A” e “B” da curva p - V , apresentada na Figura 12 (HEYWOOD, 2018) e pela Equação 7.

$$W_{c,i} = \oint p \cdot dV \quad (7)$$

Onde:

- $W_{c,i}$ Trabalho indicado por ciclo [kJ];
 p Pressão no interior do cilindro [kPa];
 V Volume do cilindro [m³].

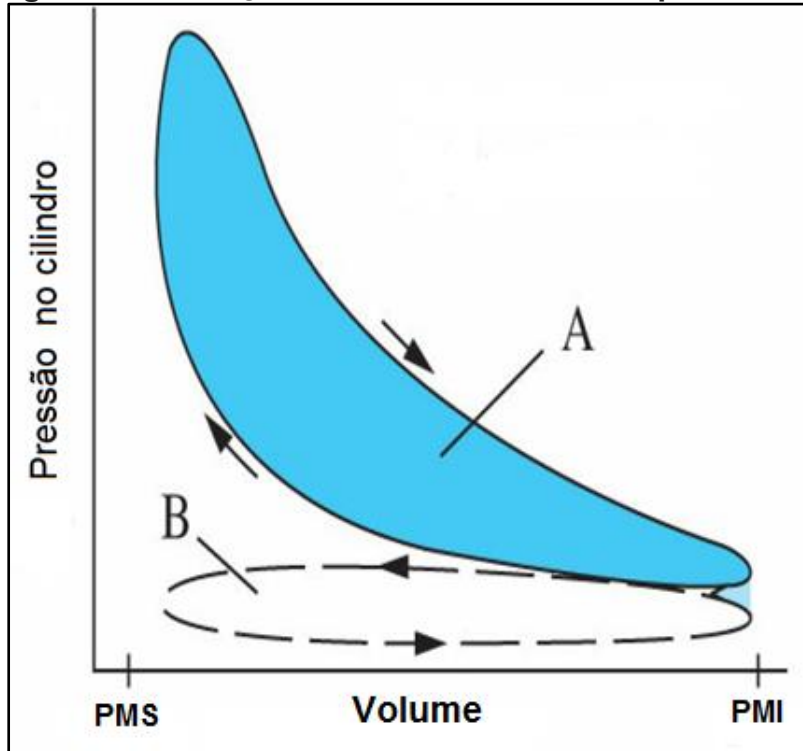
Assim, a pressão média indicada (IMEP) é dada pela razão entre o trabalho líquido indicado por ciclo ($W_{c,i}$) pelo volume deslocado, Equação 8:

$$IMEP = \frac{W_{c,i}}{V_d} \quad (8)$$

Onde:

- $IMEP$ Pressão média indicada [kPa];
 V_d Volume deslocado [m³].

Figura 12 - Variação da Pressão no cilindro por volume



Fonte: Adaptado de Heywood (2018)

A pressão média efetiva, no eixo BMEP (*Brake Mean Effective Pressure*) é obtida diretamente pelo torque e a cilindrada total do motor, Equação 9.

$$BMEP = \frac{2 \cdot \pi \cdot T}{V_B \cdot \omega} \quad (9)$$

Onde:

$BMEP$ Pressão média efetiva [kPa];

V_B Revoluções do eixo virabrequim por ciclo [2 para quatro tempos].

A pressão média por atrito (FMEP) está relacionada com as perdas de potência por atrito e carga no bloco do motor, é definida pela diferença entre PMI e PME.

3.3 Combustíveis

Combustível é uma substância química utilizada com finalidade de liberar energia diretamente a partir de sua queima ou pela sua transformação em outros produtos também combustíveis. Os mais comuns são: o gás natural, o gás liquefeito de petróleo (GLP), a gasolina, o óleo diesel, o querosene de aviação, o etanol combustível, o biodiesel e suas misturas (ANP, 2018).

O petróleo bruto é, atualmente, a principal fonte primária para produção de combustíveis, respondendo por mais de 95% da energia utilizada no setor de transportes. A gasolina e o óleo diesel são produtos resultantes de destilação fracionada do petróleo e os portadores de energia mais utilizados em motores de ignição por centelha e ignição por compressão (HEYWOOD, 2018).

A quantidade máxima de energia química que pode ser liberada por um combustível é obtida quando a reação ocorre de forma estequiométrica, significando que a quantidade de oxigênio foi suficiente para converter todo o carbono contido no combustível em CO₂ e todo o hidrogênio em água (H₂O) (PULLKRABEK, 2003).

3.3.1 Biocombustíveis

Biocombustíveis são compostos derivados de biomassa, que podem ser empregados diretamente ou mediante alterações em motores a combustão interna, substituindo parcial ou totalmente os combustíveis de origem fóssil (ANP, 2018).

São fabricados a partir de uma base vegetal como a cana-de-açúcar, mamona, soja, canola, babaçu, mandioca, milho, beterraba e algas. O etanol, o metanol e o biodiesel são exemplos destes combustíveis.

3.3.1.1 Etanol combustível

O etanol, biocombustível de primeira geração, é um álcool etílico, composto orgânico da família dos álcoois, de fórmula molecular CH₃CH₂OH (C₂H₆O) e obtido por fermentação de açúcares encontrados em vegetais, cereais, beterraba, cana-de-açúcar e resíduos celulósicos, compostos renováveis. As propriedades do etanol

anidro e hidratado combustível e as propriedades do óleo diesel são apresentados na Tabela 4.

Em 1931, Harry R. Ricardo, projetista de motores a combustão interna, realizou extensivos estudos sobre a utilização de álcool como combustível em MCI. Seu trabalho, pioneiro envolvendo pré-ignição, levou ao desenvolvimento do número de octanas (ON) para combustíveis e mostrou que é possível a utilização do etanol com maiores razões volumétricas de compressão em função de sua decrescente propensão a autoignição. Ricardo observou que o etanol possui alto calor latente de vaporização, baixas temperaturas de chama, quando comparado aos combustíveis que têm o petróleo como base, e estas características podem ser exploradas visando ao aumento da potência, redução de perdas térmicas e emissões de poluentes (SARATHY et al. 2014).

O óleo diesel é um combustível líquido derivado do petróleo e tem em sua composição, majoritariamente, hidrocarbonetos com cadeias de 8 a 16 carbonos e, menor proporção, nitrogênio, enxofre e oxigênio. A Agência Nacional do Petróleo (ANP) número 50, de 23.12.2013 - DOU 24.12.2013, regulamenta as especificações do óleo diesel de uso rodoviário no Brasil em:

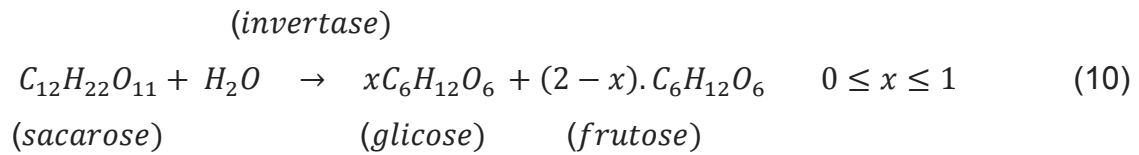
1. Óleo diesel A: produzido pelo processo de refino de petróleo, sem a adição de biodiesel, destinados a motores do ciclo Diesel, de uso rodoviário;
2. Óleo diesel B: produzido pelo processo de refino de petróleo, com adição de biodiesel no teor estabelecido pela legislação vigente;
3. Óleo diesel A S10 e B S10: combustível com teor de enxofre máximo de 10 mg/kg;
4. Óleo diesel A S 500 e B S 500: combustível com teor de enxofre máximo de 500 mg/kg.

Tabela 4 - Propriedades do etanol combustível e do óleo diesel

Propriedades	Etanol Anidro	Etanol Hidratado	Óleo Diesel
Fórmula Química	C ₂ H ₅ OH	C ₂ H ₅ OH-H ₂ O	C ₁₂ H ₁₆
Biodiesel (ácido graxo tipo oleico)	-	-	C ₁₇ H ₃₃ CO ₂ CH ₃
Massa Específica a 20 °C (kg/l)	0,79	0,81	849,1* atm (kg/m ³)
Massa Molecular (g/mol)	46,07	47,42	
Composição em Massa (%)			
Carbono (C)	52,20	47,00	-
Hidrogênio (H)	13,10	12,00	-
Oxigênio (O)	34,70	34,00	-
Pureza (%)	Min. 99,30	Min. 92,60	-
Temperatura de Ebulição (101,325 kPa) (°C)	78,50	77,00	150-471
Temperatura de Autoignição (°C)	363,00	363,00	>225
Poder Calorífico Inferior (MJ/kg)	26,80	24,92	41,90*
Calor Latente de Vaporização (kJ/kg)	904,35	992,27	250-290
Pressão de Vapor (bar)	-	29,0	-
Velocidade Laminar da Chama	-	0,42	-
Limite de Inflamabilidade Inferior (vol. %)	4,30	3,30	1
Limite de Inflamabilidade Superior (vol. %)	19,00	19,00	6
Razão Estequiométrica ar/etanol (base mássica)	9,00:1	8,30:1	14,7 (8,5% v/v de biodiesel)
Número de Octanas de Pesquisa (RON)	108,60	110,00	-
Número de Octanas Motor (MON)	89,70	92,00	-
Número de Cetano mínimo para óleo diesel comum	-	-	42
Solubilidade em Água (%)	100	100	Desprezível
Viscosidade a 20 °C (mPa.s)	1,22	1,20	3,33* 40 °C (mm ² /s)

Fonte: Adaptado de Costa e Sodr  (2011), * dados de pesquisa de Oliveira (2018) e Petrobr s (2018)

No Brasil o etanol   produzido, principalmente, a partir da cana-de-a ugar. O mela o da cana cont m aproximadamente 40% de sacarose, cuja hidr lise   realizada por uma enzima conhecida como “invertase”, produzindo glicose mais frutose, Equa o 10 (COSTA e SODR , 2010):



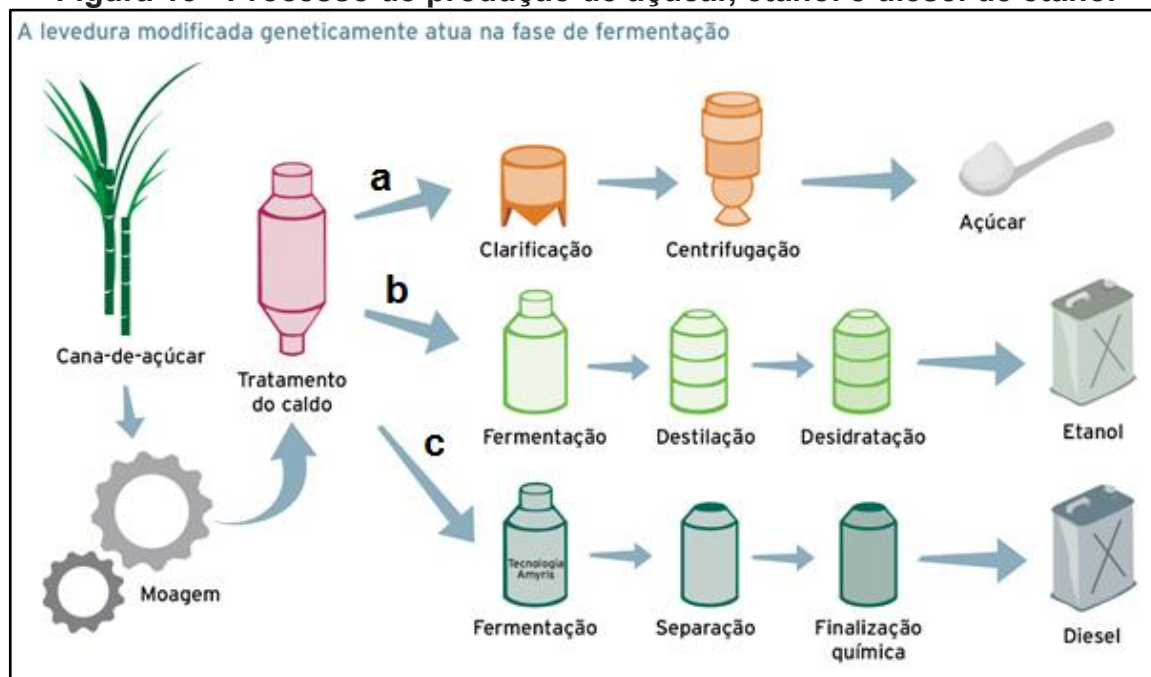
Após a produção de glicose a partir da sacarose e ação da invertase, o etanol é produzido pela fermentação na presença de outra enzima, a “zimase”, que decompõe o açúcar (glicose) produzindo álcool e dióxido de carbono, Equação 11 (COSTA e SODRÉ):



O produto da fermentação é determinado pela escolha da levedura (enzima). Uma empresa norte americana (*Amyris-Crystalsev*), especialista em tecnologia de manipulação genética, desenvolveu uma levedura, a partir de modificações genéticas em linhagens comerciais, capaz de produzir uma substância conhecida como farnesano (diesel da cana) ao invés de etanol, processo que pode ser observado na linha “c” da Figura 13. O diesel da cana pode ser utilizado em qualquer motor Diesel, caminhões, ônibus, tratores e, quando adicionado ao querosene de aviação, torna-se bioquerosene de aviação (BioQav).

Atualmente, o querosene de aviação pode receber a adição de 10% de diesel de cana para abastecimento de aviões (BioQav). Esse limite está previsto em homologações realizadas pela ASTM (*American Society for Testing and Materials*) D7566 e ANP (Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis) (NOVA CANA, 2017; ÚNICA, 2014).

Figura 13 - Processo de produção de açúcar, etanol e diesel de etanol



Fonte: Adaptado de Bioenergia, Pesquisa FAPESP (2008)

Da destilação do líquido resultante da fermentação, na linha “b” da Figura 13, em colunas de fracionamento, o etanol hidratado (6,8% de água v/v) é obtido, comportando-se como uma substância pura (substância azeotrópica). Para obtenção do etanol anidro, o etanol hidratado deve ser tratado com óxido de cálcio (CaO) e destilado ou desidratado (COSTA e SODRÉ, 2010).

Como combustível, o etanol pode ser utilizado diretamente na forma hidratada (EHC, Etanol Hidratado Combustível) com teor volumétrico mínimo de 94,5% de etanol e entre 6,2 e 7,5% de massa de água, ou adicionado à gasolina (EAC, Etanol Anidro Combustível), com teor volumétrico mínimo de 98% de etanol e máximo de 0,7% de massa de água, de acordo com a resolução ANP nº 19, de 15.4.2015 (MORAIS, 2016).

O etanol é mais reativo que os combustíveis fósseis. Em sua estrutura molecular a cadeia carbônica é formada por ligações não polares e a presença do radical hidroxila caracteriza uma ligação polar. Esse fato explica a solubilidade do etanol tanto em gasolina (não polar) quanto em água (polar). A formação das pontes de hidrogênio, nas moléculas de etanol, resulta em maiores temperaturas de ebulição quando comparado à gasolina (COSTA e SODRÉ, 2010).

Uma forma de avaliar a vantagem de utilização de um biocombustível é através do balanço energético, mostrado por Anater et al. (2016), na Equação 13. Esta

equação relaciona a energia empregada no processo de produção e a energia contida no biocombustível produzido. Na maioria dos cultivos, quase o total da energia utilizada é de origem fóssil. Quanto maior a utilização de combustíveis fósseis no processo de produção de um biocombustível, menos renovável este será (ANATER et al., 2016).

$$\text{Balanço Energético} = \frac{\text{Energia Produzida}}{\text{Energia Empregada}} [-] \quad (13)$$

O etanol da cana-de-açúcar possui balanço energético positivo e elevado quando comparado a outras culturas, como a do milho ou a da beterraba, por exemplo, que não passam de duas unidades como observado na Tabela 6. Para cada unidade de combustível fóssil utilizada durante a produção do etanol, da cana-de-açúcar, 9,3 unidades de energia renovável foram produzidas em 2005 e com previsão de atingir 11,6 em 2020 (LOPES et al., 2016).

Tabela 5 - Balanço energético da produção de etanol de diferentes culturas

Matéria-Prima	Balanço Energético	Emissões Evitadas
Cana-de-açúcar	9,3	89%
Milho	0,60-2,00	(-)30% a 38%
Trigo	0,97-1,11	19% a 47%
Beterraba	1,20-1,80	35% a 56%
Mandioca	1,60-1,70	63%
Resíduos Lignocelulósico* (Etanol 2G)	8,30-8,40	66% a 73%

*Estimativa Teórica, processo em desenvolvimento.

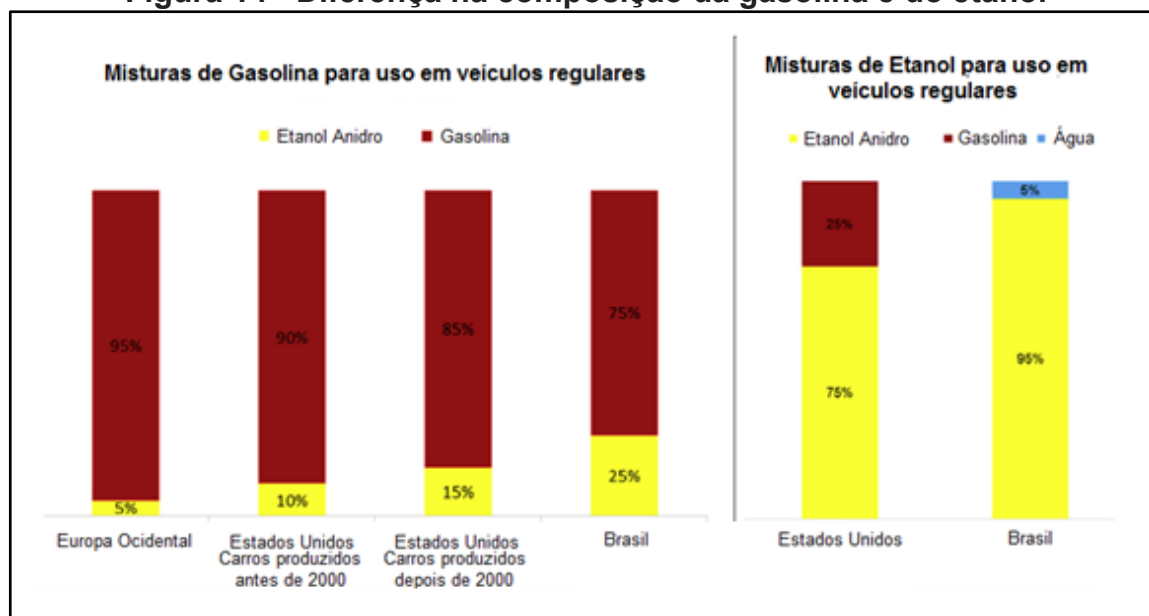
Fonte: Adaptado de Lopes et al. (2016).

Lopes et al. (2016) estimaram que o etanol produzido da cana de açúcar pode alcançar reduções nas emissões de GEE entre 40 e 60% quando comparado ao processo de produção da gasolina.

A quantidade de etanol adicionada à gasolina no Brasil é a maior quando comparada a outros países (27% v/v) e na Figura 14, o autor considera o percentual mínimo de 25%. Adicionalmente, o Brasil se tornou o único país a utilizar o etanol puro

como combustível, levando vantagem sobre os Estados Unidos e Europa na aplicação dessa tecnologia (PAULINO DE SOUZA et al., 2018).

Figura 14 - Diferença na composição da gasolina e do etanol



Fonte: Adaptado de Paulino de Souza et al. (2018)

Em comparação com o óleo diesel e a gasolina, algumas características do etanol são relevantes:

1. Maior número de octanas, o que lhe garante características antidetonantes e a possibilidade de operar em maiores razões volumétricas de compressão ou aumento de pressão de admissão, possibilitando ganho de potência;
2. Em função do alto calor latente de vaporização, quando misturado ao ar, ocorre o resfriamento da mistura melhorando a eficiência volumétrica, porém, apresenta problemas na partida a frio para temperaturas inferiores a 13 °C (ponto de fulgor do etanol);
3. Devido à alta velocidade laminar de propagação da chama permite-se operar com misturas diluídas ou mais pobres;
4. A combustão do etanol pode ocorrer também em misturas ar/combustível mais ricas, assim são obtidas maiores potências;
5. Com a combustão mais rápida, temperatura da chama menor, obtêm-se menores perdas de calor nas paredes do cilindro;

6. A combustão do etanol gera um volume maior de produto ocasionando maiores pressões;
7. Embora maiores potências possam ser obtidas com o etanol, seu consumo é sempre maior em relação à gasolina e ao diesel;
8. Em geral, a utilização de álcoois apresenta uma menor taxa de liberação de calor resultando em menores emissões de NO_x e reduzidos ruídos de combustão (BRUSSTAR et al., 2002; COSTA; SODRÉ, 2010; MARTINS; LANZANOVA, 2015; MORAIS, 2016).

3.3.1.2 Etanol de segunda geração

Etanol produzido a partir de biomassa Lignocelulósica é conhecido como “etanol 2G” ou etanol de segunda geração. Obtido através de resíduos agrícolas celulósicos como o bagaço e a palha da cana-de-açúcar, cascas, gramíneas e resíduos florestais. O uso do bagaço para produzir o etanol 2G pode elevar a produção entre 30 e 40% sem aumentar a área cultivada (PACHECO, 2011).

Em avaliação realizada por Watanabe et al. (2015), além do aumento significativo da produção com a integração das tecnologias de produção do etanol de primeira e de segunda geração, reduções nas emissões de GEE são maiores que as observadas no estudo realizado por Lopes et al. (2016), que consideraram somente a produção de primeira geração, obtendo redução de 86,4 para 14,6 (g CO₂-eq/MJ) em relação ao processo de produção da gasolina. As emissões podem atingir valores ainda menores, até mesmo valores negativos, quando é contabilizada a bioeletrecidade produzida durante o processo de produção do etanol (com a queima de resíduos) para substituir a energia produzida pela utilização de gás natural (-10,5g CO₂-eq/MJ). Porém, o desenvolvimento do processo de produção de segunda geração vem enfrentando problemas econômicos para seu desenvolvimento.

Adicionalmente, tecnologias para produção de biocombustíveis que não utilizam matéria prima comum à base alimentar estão sendo desenvolvidas. São tecnologias para biocombustíveis de terceira e quarta geração.

Os biocombustíveis de terceira geração têm as algas como matéria prima e não utiliza áreas aráveis para sua produção, mas também vêm enfrentando problemas econômicos e competição com a indústria farmacêutica, mais rentável (WATANABE

et al., 2015).

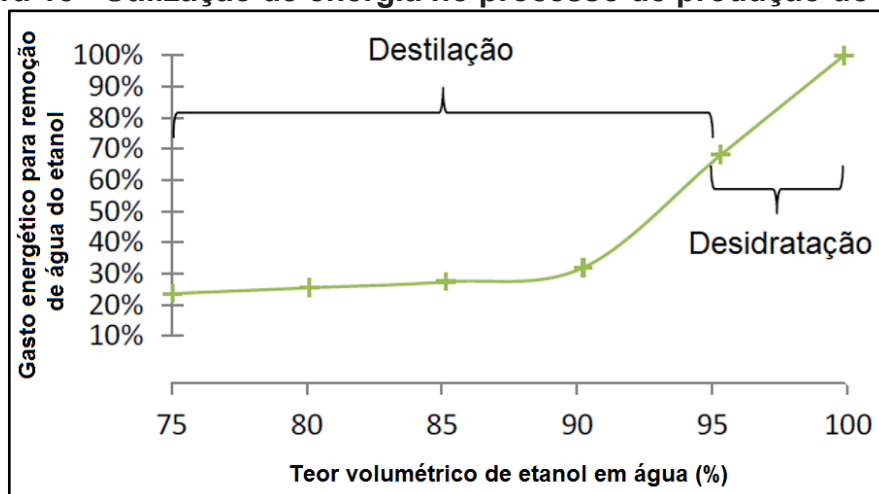
Os biocombustíveis de quarta geração representam a tecnologia mais recente. São obtidos por um processo de captura do CO₂ atmosférico e, através de uma reação catalítica iniciada por um pulso de tensão em um catalisador de carbono, cobre e nitrogênio, desencadeia reações químicas que, essencialmente, revertem o processo de combustão transformando o CO₂ diretamente em etanol (LANZANOVA, 2017).

3.3.1.3 Etanol sobre hidratado

Não há na literatura um termo comum para designar o etanol com hidratações acima à das especificações ANP. Alguns autores utilizam o termo “Superhidratado” ou “Sobrehidratado” e “*Wet Ethanol*” (*sub-azeotropic hydrous ethanol*) é forma utilizada em inglês. Nesse trabalho, o etanol combustível com índices de hidratação acima aos especificados pela ANP serão tratados como: “Etanol Sobrehidratado” (ESH).

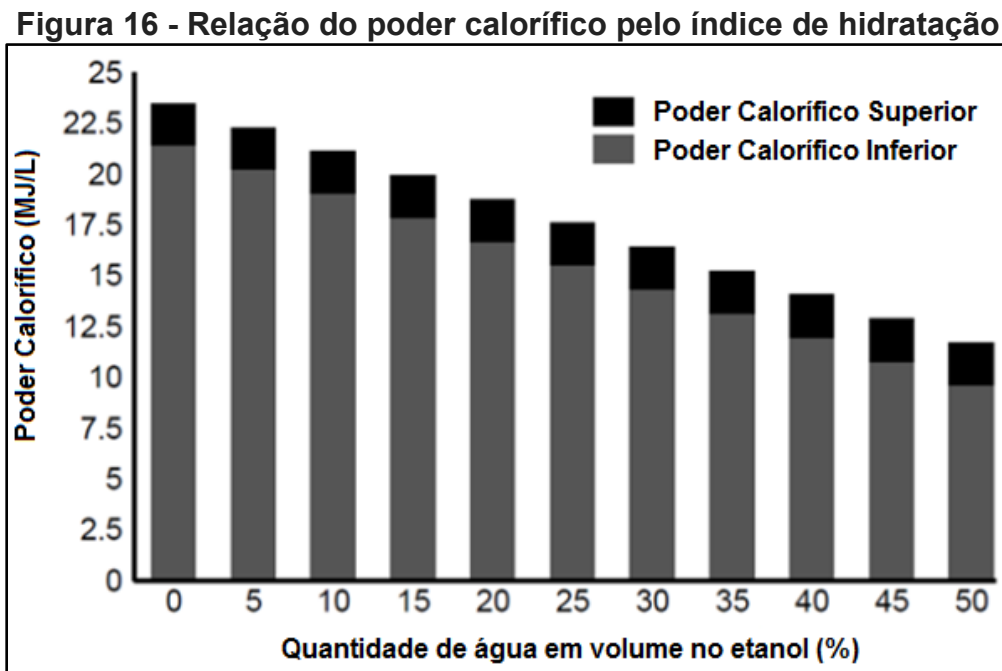
A utilização do etanol como combustível ainda está atrelada a altos custos de produção, diretamente relacionados com o consumo de energia durante o processo de destilação e posterior desidratação, como na Figura 15. De acordo com os autores Ambrós (2015), Ambrós et al. (2015), Fagundez et al. (2017), Khaliq, Trivedi e Dincer (2011), Lanzanova (2017), Mack, Aceves e Dible (2009) e Martins, Lanzanova e Sari (2015) a utilização do etanol com elevada hidratação pode reduzir os custos de produção em valores entre 3 a 37%.

Figura 15 - Utilização de energia no processo de produção do etanol



Fonte: Adaptado de Lanzanova (2017)

A maior desvantagem na utilização de etanol sobrehidratado está relacionada com a redução do poder calorífico inferior (PCI) com a elevação no índice de hidratação. A Figura 16 apresenta a relação entre PCI e índice de hidratação do etanol. Assim, com a redução do PCI, um aumento na vazão mássica de combustível é necessário para a compensação da redução de energia com o aumento da hidratação, em motores a combustão interna.



Fonte: Adaptado de Bilhão (2015)

3.3.2 Poder calorífico

O poder calorífico (PC) de um combustível é a energia máxima por unidade de massa liberada em sua queima a volume ou pressão constante. Constituído por poder calorífico superior (PCS) e poder calorífico inferior (PCI), sendo o primeiro a soma das energias liberadas na forma de calor e de vapor d'água gerados por combustíveis oxigenados ou adicionados ao combustível. O PCI é a energia útil contida no combustível, liberada na combustão e calculado pela Equação 14 (HEYWOOD, 2018).

$$PCI = PCS - \left(\frac{m_{H_2O}}{m_c} \right) \cdot h_{fH_2O} \quad (14)$$

Onde:

- PCI Poder Calorífico inferior [kJ/kg];
 m_{H_2O} Massa de água após a queima ou adicionada [Kg];
 m_c Massa de combustível [Kg];
 h_{fH_2O} Entalpia específica de formação da água [KJ/Kg].

3.3.3 Razão ar combustível

A liberação de energia em um motor a combustão interna ocorre basicamente através da combustão de hidrocarbonetos. O ar é usado para suprir a necessidade de oxigênio na reação química de combustão, a qual demanda uma quantidade adequada de ar e combustível. A composição ideal, para a combustão, é obtida pela relação ar/combustível (A/F), ou a razão entre a massa de ar e massa de combustível admitida pelo motor em um ciclo. Nos testes com motores são medidas a vazão mássica de combustível (\dot{m}_f , kg/h) e a vazão mássica de ar (\dot{m}_a , kg/h). A relação A/F é dada pela Equação 15 (HEYWOOD, 2018):

$$\frac{A}{F} = \frac{\dot{m}_a}{\dot{m}_f} \quad (15)$$

A faixa de operação para motores SI convencionais, usando gasolina é de $12 \leq A/F \leq 15$, usando etanol é de $8,30 \leq A/F \leq 9,00$ e para motores CI, operando com diesel é $20 \leq A/F \leq 80$ (HEYWOOD, 2018; OLIVEIRA, 2015).

A relação entre a mistura ar/combustível, admitida pelo motor, e a razão ar/combustível estequiométrica $(A/F)_S$ é definida como razão de equivalência estequiométrica ar/combustível (λ) e dada pela Equação 16 (HEYWOOD, 2018):

$$\lambda = \frac{(A/F)}{(A/F)_S} \quad (16)$$

Outro parâmetro também utilizado é a razão de equivalência estequiométrica combustível/ar (ϕ) definido pela Equação 17:

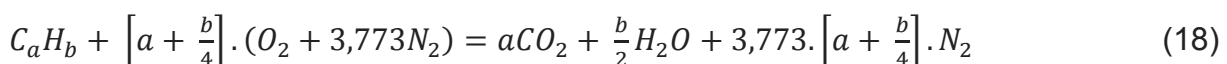
$$\phi = \frac{(F/A)}{(F/A)_S} \quad (17)$$

Esses parâmetros são assim relacionados:

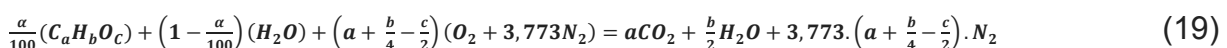
1. Mistura estequiométrica: $\phi=1, \lambda=1$;
2. Mistura rica: $\phi>1, \lambda<1$;
3. Mistura pobre: $\phi<1, \lambda>1$.

3.3.4 Combustão estequiométrica

Motores do ciclo Otto operam com a razão ar/combustível próximo da razão estequiométrica, significando que há oxigênio suficiente para que o combustível seja totalmente oxidado. Isto significa que todo carbono é convertido em CO_2 e todo hidrogênio em H_2O . Considerando que essas relações dependam somente da conservação da massa de cada elemento dos reagentes, com a composição molar do combustível e as proporções de ar combustível é possível estabelecer uma relação entre a composição dos reagentes e dos produtos. A Equação 18, é a equação geral para descrever a combustão estequiométrica de hidrocarbonetos (HEYWOOD, 2018):



Para o combustível hidratado (contendo água), a Equação 19, utilizada por Justino (2017):



Onde:

- C Carbono;
- H Hidrogênio;
- O Oxigênio;
- a Número de átomos de carbono [kmol de combustível];
- b Número de átomos de carbono [kmol de combustível];
- c Número de átomos de carbono [kmol de combustível];
- α Percentual em base mássica de água [%].

A razão A/F estequiométrica pode ser obtida pela Equação 20 (HEYWOOD, 2018):

$$\left(\frac{A}{F}\right) S = \frac{(n_{O_2} \times MM_{O_2}) + 3,773 \cdot (n_{N_2} \times MM_{N_2})}{(n_c \times MM_c) + (n_H \times MM_H)} \quad (20)$$

Onde:

- n_{O_2} Número de moles de oxigênio [mol];
- n_{N_2} Número de moles de nitrogênio [mol];
- n_c Número de moles de carbono [mol];
- n_H Número de moles de hidrogênio [mol];
- MM_{O_2} Massa molar do oxigênio [g/mol];
- MM_{N_2} Massa molar do nitrogênio [g/mol];
- MM_c Massa molar do carbono [g/mol];
- MM_H Massa molar do hidrogênio [g/mol].

3.3.5 Consumo específico e eficiência global

Em motores a combustão interna o consumo de combustível é dado pela vazão mássica por unidade de tempo. Porém, o parâmetro mais utilizado é o consumo específico de combustível (*sfc*), que relaciona a vazão mássica de combustível por unidade de energia produzida, determinando a eficiência de conversão do combustível e dado pela Equação 18 (HEYWOOD, 2018):

$$sfc = \frac{\dot{m}_f}{P} \quad (18)$$

Onde:

sfc Consumo específico de combustível [g/kW.h];

\dot{m}_f Vazão mássica de combustível [g/h];

P Potência [kW].

Para os motores SI, a gasolina, o consumo específico desejável fica em torno de 235 g/kW.h e para os motores CI, valores menores que 180 g/kW.h são esperados.

A eficiência de conversão de combustível é a razão do trabalho útil no eixo do motor pela energia total disponível no combustível, dada pela Equação 19 (HEYWOOD, 2018):

$$\eta_t = \frac{3,6 \cdot P_b}{PCI \cdot \dot{m}_f} \cdot 100 \quad (19)$$

Onde:

η_t Eficiência Global [Adimensional];

P_b Potência no eixo [kW];

\dot{m}_f Vazão mássica de combustível [kg/h];

PCI Poder Calorífico inferior [kJ/kg].

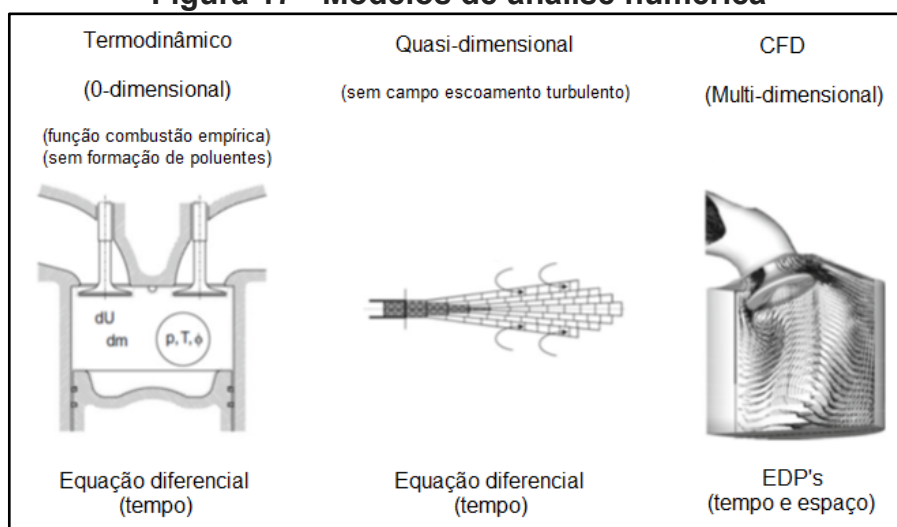
3.4 Análise numérica

Um dos principais desafios da engenharia é descrever, através de ferramentas numéricas, processos e fenômenos com fidelidade a fim de caracterizar o comportamento dinâmico de sistemas complexos. No que diz respeito aos motores a combustão interna, como sistemas de propulsão, a análise de todo o processo têm particular importância.

O comportamento do motor pode ser descrito através de modelos matemáticos, considerando todos os efeitos relevantes para a tarefa de concreta otimização, sem a necessidade de alterações físicas. Essa técnica (simulação) tem vantagem considerável na redução de custos com eventos experimentais e tempo empregado na construção do projeto, mas cabe ressaltar que a simulação não substitui os ensaios tradicionais (GÜNTER, SCHWARZ e TEICHMANN, 2012).

Os pré-requisitos para a simulação numérica de motores a combustão interna são a obtenção dos modelos termodinâmicos, químicos e mecânicos para descrição técnica do processo, onde a compreensão dos fenômenos termodinâmicos e da cinética das reações químicas são essências para modelagem. Com os modelos, exemplificados na Figura 17, é possível descrever o comportamento termodinâmico, o escoamento de fluídos, a transferência de calor, a combustão e o fenômeno de formação de poluentes, aspectos que governam o desempenho e eficiência de um motor a combustão interna (HEYWOOD, 2018).

Figura 17 - Modelos de análise numérica



Fonte: Adaptado de Günter, Schwarz e Teichmann (2012)

Os modelos aplicados à avaliação de desempenho e emissões são divididos em dois grupos: termodinâmicos (baseados em leis de conservação da física) e fluidodinâmicos (análise do escoamento do fluido). Os termodinâmicos são subdivididos em:

1. Zero dimensional (termodinâmicos de zona simples) - baseados na equação de conservação de energia (primeira lei da termodinâmica). Realiza a análise termodinâmica do gás dentro do cilindro, considerando a pressão e temperatura uniformes, ausência de qualquer modelagem de fluxo e fenômenos de transferência, sendo o tempo a única variável independente;
2. Fenomenológico - além da equação de conservação de energia, podem ser modelados pelas leis de conservação da massa e de movimento, são adicionados os efeitos de transferência de calor e massa, em cada evento nas equações de conservação de energia;
3. Quasi-dimensionais (termodinâmicos de zonas múltiplas) - são adicionados aos modelos termodinâmicos características geométricas específicas como o formato da chama em SI, do *spray* nos motores CI, velocidade de propagação de chama e pode ser acrescentado também direção ao fenômeno. Consideram a distribuição temporal e espacial da temperatura e a concentração de combustível na mistura.

Modelos fluidodinâmicos ou CFD (*Computational Fluid Dynamics*) são classificados como multidimensionais (HEYWOOD, 2018).

Os modelos de simulação da combustão ainda podem ser classificados como (MELO, 2012):

1. De caráter preditivo - objetivam a previsão de desempenho, consumo e emissões, a partir da modelagem de fenômenos físicos e químicos que governam os processos;
2. De caráter diagnóstico - utilizam dados experimentais como entrada para um modelo em que os resultados formarão um diagnóstico.

3.4.1 AVL Boost

O AVL *Boost*® é um *software* de simulação capaz de modelar inteiramente um motor a combustão interna e foi desenvolvido pela empresa austríaca AVL GmbH (*Anstalt für Verbrennungskraftmaschinen List*), Instituto para Motores a Combustão Interna (tradução livre). Utilizado para simulação de ciclos e troca de gases, permite construir modelos completos através de seleção simples de elementos em menu secundário. (Anexo A).

O *Boost*® é um *software* de caráter preditivo (possibilita a previsão de desempenho, consumo e emissões), que permite a simulação quasi-dimensional do processo de combustão. Considera a dinâmica dos gases nos dutos unidimensional possibilitando a simulação de fenômenos em regime estacionário e transiente. O método numérico de *Godunov*, aplicado às leis de conservação, garante sua solução com alta precisão (AVL *Theory*, 2018; MATHWORKS, 2018).

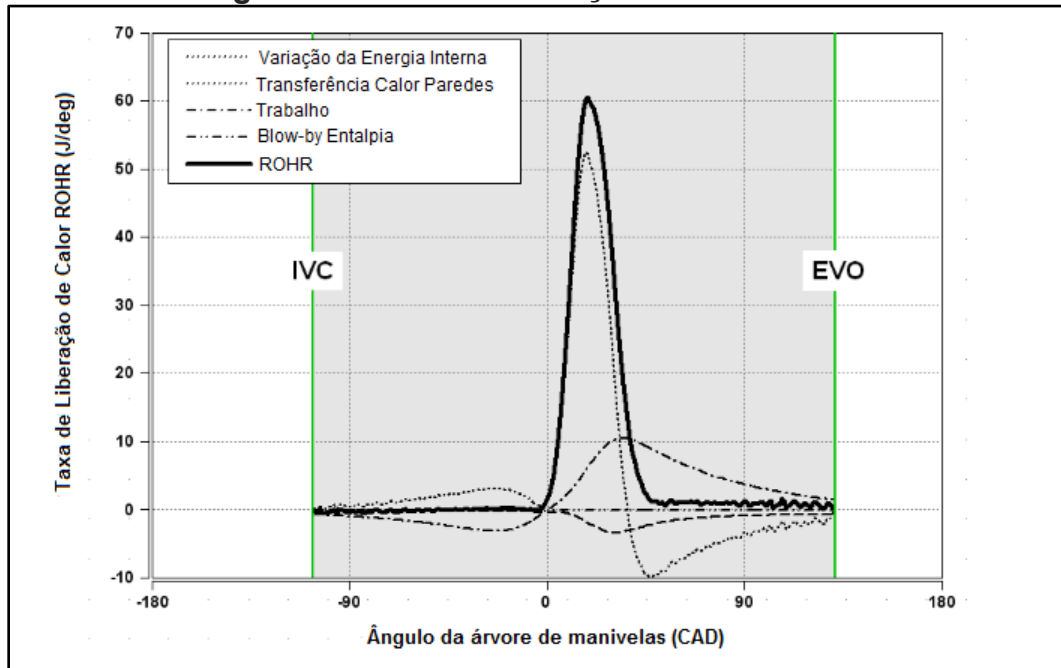
O *software* AVL *BOOST*® está disponível no laboratório de informática e no CPMEC (Centro de Pesquisa em Motores, Emissões e Combustíveis) da PUC-Minas. Os principais parâmetros para o desenvolvimento desse trabalho são descritos nos próximos itens.

3.4.2 AVL Burn

O AVL *Burn* é parte do *Boost*®, uma ferramenta designada como “*utilities*”. De caráter diagnóstico, usada para análise da combustão através de dados experimentais. Essa ferramenta realiza o processo inverso de caracterização da combustão, ou seja, a taxa de liberação de calor (ROHR) pode ser obtida através do traço de pressão experimental. Esse procedimento inverso é conhecido como análise da combustão.

A taxa de liberação de calor é calculada somente no ciclo fechado durante a fase de alta pressão. Isto é, quando as válvulas estão fechadas, desde o fechamento da válvula de admissão (IVC) até antes a abertura da válvula de exaustão (EVO). As variáveis e o comportamento da taxa de liberação de calor são mostrados na Figura 18:

Figura 18 - Taxa de liberação de calor ROHR



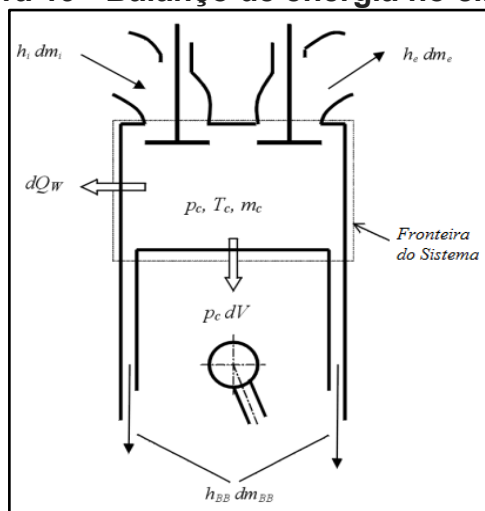
Fonte: adaptado de AVL Theory (2018)

O algoritmo para a análise da combustão, utilizado pelo *Boost*®, é baseado na primeira lei da termodinâmica. No caso de aplicação em motores a combustão interna, considera-se que a variação da energia interna, no cilindro, é igual a soma do trabalho realizado pelo pistão, a energia fornecida pelo combustível, a energia transferida para às paredes do cilindro e o fluxo de entalpia devido ao *blow-by*.

3.4.3 Equação básica de conservação de energia no cilindro

O AVL *Boost*® baseia-se na primeira lei para determinar os estados termodinâmicos no cilindro, considerando o trabalho realizado pelos gases sobre o pistão, o calor liberado na queima do combustível, a troca térmica dos gases com as paredes do cilindro, pistão e cabeçote, o fluxo de entalpia através das válvulas de admissão e exaustão e fluxo de entalpia pelo *blow-by*. A Figura 19 apresenta essa relação de balanço de energia no cilindro do motor (AVL Theory, 2018):

Figura 19 - Balanço de energia no cilindro



Fonte: Adaptado de AVL Theory (2018)

A variação da energia interna do cilindro é obtida pela Equação 20:

$$\frac{d(m_c \cdot u)}{d\theta} = -p_c \cdot \frac{dV}{d\theta} + \frac{dQ_F}{d\theta} - \sum \frac{dQ_W}{d\theta} - h_{BB} \cdot \frac{dm_{BB}}{d\theta} + \sum \frac{dm_i}{d\theta} \cdot h_i - \sum \frac{dm_e}{d\theta} \cdot h_e - q_{ev} \cdot f \cdot \frac{dm_{ev}}{d\theta} \quad (20)$$

Onde:

θ Ângulo do eixo virabrequim [° CA];

p_c Pressão no interior do cilindro [Pa];

m_c Massa do gás no interior do cilindro [Kg];

T_c Temperatura interna do cilindro [K];

V_c Volume do gás no do cilindro [m³];

$\frac{d(m_c \cdot u)}{d\theta}$ Taxa de variação da energia interna [kW];

$p_c \cdot \frac{dV}{d\theta}$ Trabalho realizado pelo pistão [kJ];

$\frac{dQ_F}{d\theta}$ Taxa de calor liberado pelo combustível [kW];

$\sum \frac{dQ_W}{d\theta}$ Somatório das taxas de calor transferido através das paredes [kW];

$h_{BB} \cdot \frac{dm_{BB}}{d\theta}$ Fluxo de entalpia pelo *blow-by* [kJ/kg];

$\sum \frac{dm_i}{d\theta} \cdot h_i$ Somatório do fluxo de entalpia pela válvula de admissão [kJ/kg];

$\sum \frac{dm_e}{d\theta} \cdot h_e$ Somatório do fluxo de entalpia pela válvula de exaustão [kJ/kg];

$q_{ev} \cdot f \cdot \frac{dm_{ev}}{d\theta}$ Fluxo de calor por evaporação do combustível [kJ].

3.4.4 Variação da massa no cilindro

A taxa de variação da massa de gás no cilindro ($\frac{dm_c}{d\theta}$) é determinada pela Equação 21, da conservação da massa, que considera a soma dos fluxos de gás que entram no cilindro menos os fluxos que saem (AVL Theory, 2018):

$$\frac{dm_c}{d\theta} = \sum \frac{dm_i}{d\theta} - \sum \frac{dm_e}{d\theta} - \frac{dm_{BB}}{d\theta} + \frac{dm_{ev}}{d\theta} \quad (21)$$

Onde:

$\frac{dm_c}{d\theta}$ Taxa de variação da massa [kg/ °CA];

$\frac{dm_i}{d\theta}$ Taxa de variação da massa de entrada [kg/ °CA];

$\frac{dm_e}{d\theta}$ Taxa de variação da massa de saída [kg/ °CA];

$\frac{dm_{BB}}{d\theta}$ Taxa de variação da massa pelo *blow-by* [kg/ °CA];

$\frac{dm_{ev}}{d\theta}$ Taxa de variação da massa de combustível evaporado [kg/ °CA].

3.4.5 Fluxo de massa pelas válvulas e blow-by

A vazão mássica máxima de ar pelas válvulas de admissão e exaustão é calculada a partir da combinação do fluxo isentrópico e/ou adiabático com a equação da continuidade, considerando a variação da área do escoamento. Para uma dada condição de estagnação, o fluxo máximo por um duto estrangulado é obtido quando a menor área da seção de escoamento encontra-se na condição crítica ou sônica, então o duto é considerado “*choked*” (saturado). A vazão mássica máxima é dada por (WHITE, 2011):

$$\dot{m}_{max} = A^* \cdot \rho_0 \cdot \sqrt{RT_0} \cdot \sqrt{k} \cdot \left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{(1/2)(k+1)}{(k-1)}} \quad (22)$$

O AVL *Boost* reescreve a Equação 22, conforme a Equação 22a, onde a vazão mássica passa a ser função do ângulo do virabrequim ($\frac{dmv}{d\theta}$), alterando a simbologia de área crítica (A^*) por área efetiva de escoamento (A_{eff}), por relação algébrica substitui ρ_0 por p_0 e por Ψ , os dois últimos termos da equação.

$$\frac{dmv}{d\theta} = A_{eff} \cdot p_0 \cdot \sqrt{\frac{2}{R \cdot T_0}} \cdot \Psi \quad (22a)$$

Onde:

$\frac{dmv}{d\theta}$ Fluxo mássico pela válvula [kg/ °CA];

A_{eff} Área efetiva de escoamento [m²];

\dot{m}_{max} Vazão mássica máxima [kg/s];

A^* Área crítica [m²];

ρ_0 Densidade estagnação [kg/ m³];

R Constante dos gases [J/kg.K];

T_0 Temperatura de estagnação [K].

Para o escoamento subsônico Ψ é substituído pela Equação 23:

$$\Psi = \sqrt{\frac{k}{k-1} \cdot \left[\left(\frac{p_2}{p_0} \right)^{\frac{2}{k}} - \left(\frac{p_2}{p_0} \right)^{\frac{k+1}{k}} \right]} \quad (23)$$

Onde:

p_2 Pressão de estagnação a jusante [Pa];

k Coeficiente politrópico [Adimensional].

E para o escoamento sônico Ψ é substituído pela Equação 24, retornando a Equação 22 de vazão mássica máxima proposta por White (2011):

$$\Psi = \Psi_{max} = \left(\frac{2}{k+1} \right)^{\frac{1}{k-1}} \cdot \sqrt{\frac{k}{k-1}} \quad (24)$$

A área efetiva de escoamento (A_{eff}) ou área crítica pode ser determinada após medições de coeficientes de fluxo e utilizando a Equação 25:

$$A_{eff} = cd \cdot \frac{d_{vi}^2 \cdot \pi}{4} \quad (25)$$

Onde:

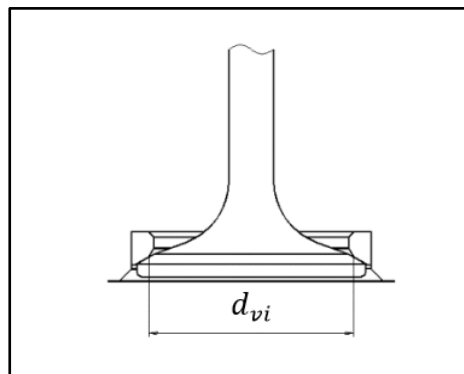
cd Coeficiente de fluxo [Adimensional];

d_{vi} Diâmetro interno da sede da válvula [m].

A variação do coeficiente de fluxo (cd) ocorre com o levantamento (abertura) da válvula. Esse coeficiente representa a razão entre a vazão mássica medida, a uma diferença de pressão e a vazão mássica teórica isentrópica, para as mesmas condições de contorno e está relacionado com a área da seção transversal do duto interligado.

O diâmetro interno da sede da válvula é utilizado para determinação, através de norma, do levantamento da válvula, representado na Figura 20:

Figura 20 - Diâmetro interno da sede da válvula



Fonte: Adaptado de AVL Theory (2018)

As perdas de *blow-by* no cilindro são determinadas considerando a pressão média no cárter e a abertura de *blow-by* (δ). O fluxo de massa pelo *blow-by* é calculado pela Equação 26, a mesma para o fluxo pelas válvulas, porém, é considerada a área efetiva de escoamento pelas fendas do cilindro (A_{blowby}).

$$A_{blowby} = D \cdot \pi \cdot \delta \quad (26)$$

Onde:

D Diâmetro do cilindro [m];

δ Abertura de *blow-by* [m].

3.4.6 Escoamento unidimensional em dutos

As equações de conservação para o fluxo unidimensional, nos dutos de admissão e exaustão, são dadas pelo sistema de equações de Euler, Equação 27 (AVL Theory, 2018):

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = S(U) \quad (27)$$

Sendo que U representa o vetor de estado, Equação 28:

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \cdot u \\ \rho \cdot \bar{c}v \cdot T + \frac{1}{2} \cdot \rho \cdot u^2 \\ \rho \cdot w_j \end{pmatrix} \quad (28)$$

Onde:

- ρ Densidade do fluido [kg/m^3]
 c_v Calor específico a volume constante [$\text{J}/\text{kg}/\text{K}$];
 T Temperatura [K];
 w_j Fração mássica de j na fase gasosa [kg/kg].
 F é o vetor fluxo, Equação 29:

$$F = \begin{pmatrix} \rho \cdot u \\ \rho \cdot u^2 + p \\ u \cdot (E + p) \\ \rho \cdot u \cdot w_j \end{pmatrix} \quad (29)$$

Sendo que, Equação 30:

$$E = \rho \cdot \bar{c}_v \cdot T + \frac{1}{2} \cdot \rho \cdot u^2 \quad (30)$$

O termo fonte $S(U)$ da Equação 27, leva em conta duas origens diferentes de acordo com a Equação 31:

$$S(U) = S_A(F(U)) + S_R(U) \quad (31)$$

O primeiro componente $S_A(F(U))$ representa as alterações axiais na seção transversal do duto, Equação 32:

$$S_A(F(U)) = -\frac{1}{A} \cdot \frac{dA}{dX} \cdot \left(F + \begin{pmatrix} 0 \\ -p \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \quad (32)$$

O segundo termo $S_R(U)$, representa as reações químicas homogêneas, termos de transferência de calor, massa entre fases gasosas e sólidas e fontes de atrito,, Equação 33 (AVL Theory, 2018):

$$S_R(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{F_R}{V} \\ -\frac{q_w}{V} \\ MW_j \cdot (\sum_i^{R_{hom}} v_{i,j} \cdot \dot{r}_i) \end{pmatrix} \quad (33)$$

Onde:

- F_R Força de atrito nas paredes do duto [N];
- q_w Fluxo de calor pelas paredes [W];
- V Volume [m³];
- MW_j Peso molecular [kg/kmol];
- i Índice de reações químicas homogêneas [Adimensional];
- j Índice de espécies químicas [Adimensional];
- \dot{r} Taxa de reação [kmole/m³/s];
- v Coeficiente estequiométrico [Adimensional].

A força de atrito nas paredes do duto é determinada através do fator de atrito da parede (λ_f) conforme a Equação 34:

$$\frac{F_R}{V} = \varphi \cdot \frac{\lambda_f}{2 \cdot d_{hyd}} \rho \cdot u \cdot |u| \quad (34)$$

Onde:

- F_R Força de atrito nas paredes do duto [N];
 d_{hyd} Diâmetro hidráulico [m];
 ρ Densidade do fluido [kg/m³];
 u Velocidade do fluido [m/s];
 φ Fator de atrito de Fanning [Adimensional].

O fator de atrito de Fanning leva em consideração a forma da seção transversal do duto de escoamento, sendo que para duto com seção circular $\varphi = 1$.

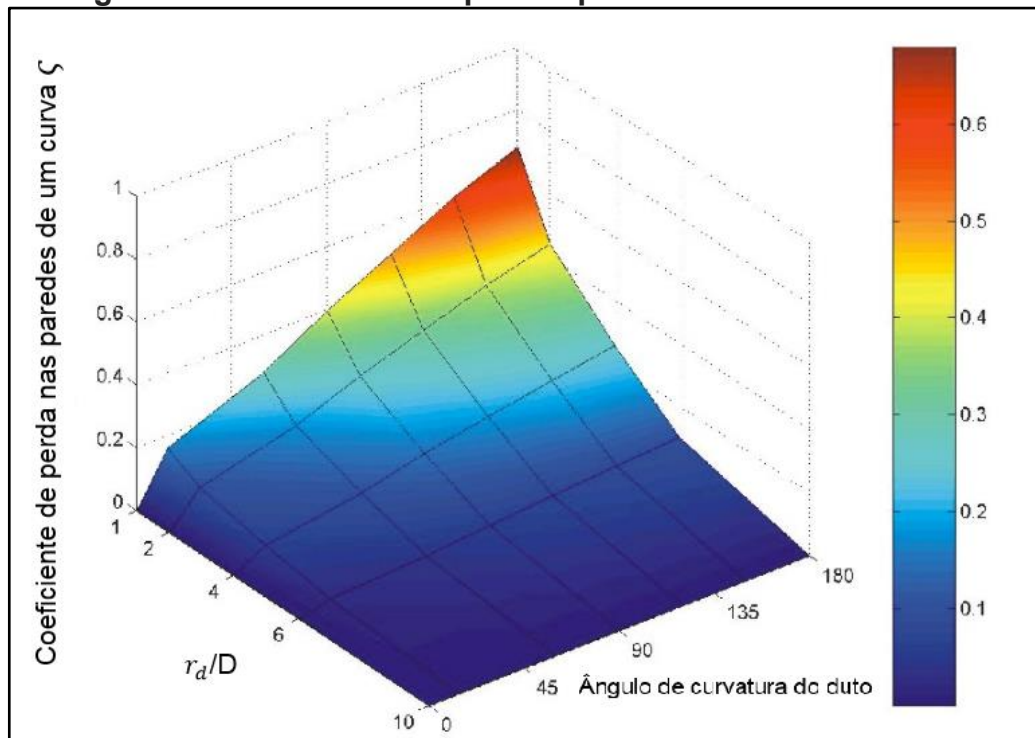
3.4.7 Perda de carga em curvas nos dutos

O AVL utiliza um modelo simples para considerar a influência de curvaturas nas perdas de carga por fricção. A perda de carga por atrito, nas paredes de uma curva, é função de um coeficiente de perda por atrito (ζ), Equação 35.

$$\Delta p = \zeta \cdot \frac{\rho \cdot v^2}{2} \quad (35)$$

Por sua vez, o coeficiente de perda por atrito na curva (ζ) é uma relação entre o ângulo de curvatura do duto (θ) e da razão entre o raio de curvatura (r_d) e o diâmetro do duto (D), essa relação é observada na Figura 21. Por essa razão, a variação do ângulo de curvatura do duto sobre o comprimento da curva também deve ser especificada durante a parametrização.

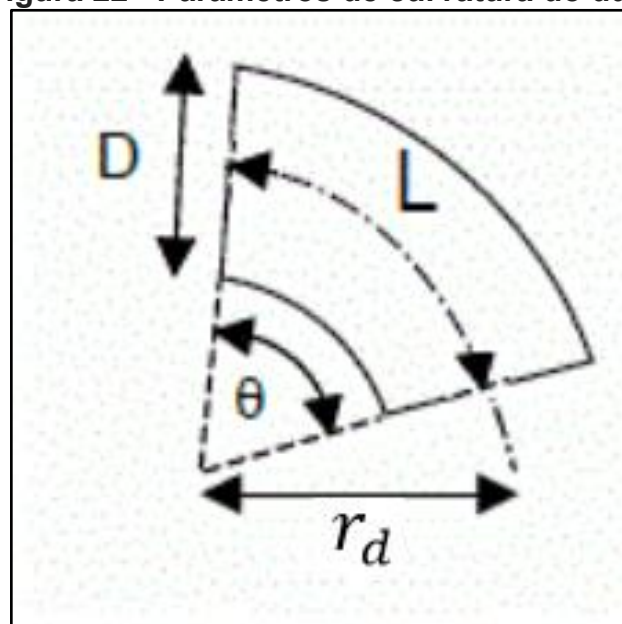
Figura 21 - Coeficiente de perdas por atrito na curva do duto



Fonte: Adaptado de AVL Theory (2018).

O raio de curvatura do duto r_d é a distância entre o centro do arco até a linha de centro do duto, Figura 22:

Figura 22 - Parâmetros de curvatura do duto



Fonte: Adaptado de AVL Theory (2018)

3.4.8 Modelo de transferência de calor na câmara de combustão

Os coeficientes utilizados para o cálculo de transferência de calor, por convecção, para as paredes do cilindro, cabeçote e pistão são: *Woschni* (Equação 37) e *Hohenberg* (Equação 39). E para o cálculo do calor transferido para as paredes (Q_p) o *software* segue o princípio de resfriamento de Newton, Equação 36 (AVL *THEORY*, 2018):

$$Q_p = A_i \cdot h_{Woschni} \cdot (T_c - T_p) \quad (36)$$

Onde:

- Q_p Calor transferido para as paredes [kJ];
- A_i Área da câmara de combustão [m²];
- T_c Temperatura do gás no interior do cilindro [K];
- T_p Temperatura da parede do cilindro [K].

O coeficiente de transferência de calor ($h_{Woschni}$) é calculado conforme Equação 37:

$$h_{Woschni} = 0,013D^{-0,2}P_c^{0,8}T_c^{-0,53}v_g^{0,8} \quad (37)$$

A velocidade do gás na entrada da válvula (v_g) é calculada pela Equação 38:

$$v_g = 2,28v_p + 0,00324(P_c - P_0) \sqrt{V_d T_1 / (P_1 V_1)} \quad (38)$$

Onde:

D Diâmetro do cilindro [m];

P_0 Pressão no interior da câmara sem combustão [Pa];

V_d Volume deslocado [m³];

P_1, V_1, T_1 Pressão, volume e temperatura válvula de admissão fechada [Pa, m³, K];

P_c, T_c Pressão e temperatura instantâneas do gás no interior do cilindro [Pa, K].

O coeficiente de transferência de calor ($h_{Hohenberg}$), usado para substituir o ($h_{Woschni}$) é calculado conforme Equação 39.

$$h_{Hohenberg} = 130 \cdot V_d^{-0,06} \cdot P_c^{0,8} T_c^{-0,4} \cdot (C_m + 1,4)^{0,8} \quad (39)$$

Onde:

C_m Velocidade média do pistão [m/s].

O modelo de *Hohenberg*, para a estimativa do coeficiente de troca térmica, é mais apropriado em função da eficácia de sua aplicação. Possui resposta mais rápida, também elimina superestimativas do coeficiente de troca térmica durante a fase de combustão, característica do modelo de *Woschni* (AMBRÓS, 2013).

3.4.9 Representação dos combustíveis

O AVL BOOST® utiliza duas formas para descrever a composição dos gases (mistura ar combustível), *Classic Species Transport* (somente um componente do combustível é selecionado para compor os gases de admissão e sua composição na exaustão é obtida através da razão ar-combustível) e *General Species Transport* (uma quantidade maior de espécies pode ser escolhida para descrever a composição dos gases).

O Boost realiza o cálculo das propriedades dos gases em cada interação, durante a simulação, obtendo a composição instantânea na câmara de combustão.

São utilizados sete coeficientes e o calor específico à pressão constante (c_p), calculado conforme a Equação 40, a entalpia (H), calculada conforme Equação 41, entropia (S), calculada conforme Equação 42 e todas as demais propriedades termodinâmicas podem ser derivadas de c_p , H e S (AVL *Theory*, 2018).

$$\frac{c_{p_j}}{R} = a_{1j} + a_{2j} \cdot T + a_{3j} \cdot T^2 + a_{4j} \cdot T^3 + a_{5j} \cdot T^4 \quad (40)$$

$$\frac{H_j}{RT} = a_{1j} + \frac{a_{2j}}{2} \cdot T + \frac{a_{3j}}{2} \cdot T^2 + \frac{a_{4j}}{2} \cdot T^3 + \frac{a_{5j}}{5} \cdot T^4 + \frac{a_{6j}}{T} \quad (41)$$

$$\frac{S_j}{R} = a_{1j} \ln T + a_{2j} \cdot T + \frac{a_{3j}}{2} \cdot T^2 + \frac{a_{4j}}{3} \cdot T^3 + \frac{a_{5j}}{4} \cdot T^4 + a_{7j} \quad (42)$$

Onde:

c_{p_j} Calor específico à pressão constante cada substância j [kJ/kg.K];

H_j Entalpia específica de cada substância j [kJ/kg];

S_j Entropia específica de cada substância j [kJ/kg.K];

R Constante universal dos gases [kJ/kmol.K];

$a_{1...5j}$ Coeficiente polinomial de cada substância j [Adimensional];

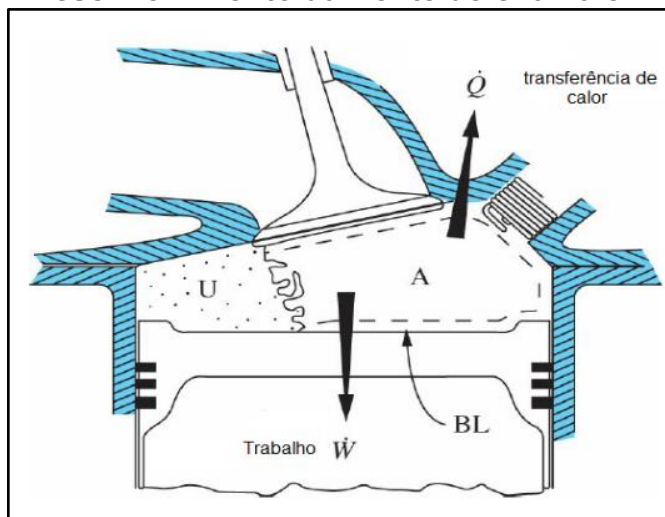
T Temperatura no cilindro [K].

3.4.10 Modelos de Combustão

Na combustão em motores SI ocorrem variações entre ciclos. Essas variações dependem do fluxo no cilindro, devido à natureza estocástica do fluxo turbulento. Esses fenômenos, atualmente, não podem ser simulados pelos códigos existentes. Por isso, em modelos 1D, a combustão é caracterizada de duas formas: pela função *Vibe* ou estimando a velocidade da chama turbulenta (ELMQVIST *et al.*, 2003).

O modelo termodinâmico *Vibe* de duas zonas, quasi-dimensional, adotado nesta pesquisa, Figura 23, divide o cilindro em duas zonas: a dos gases queimados (A) e não queimados (U). A divisão da câmara de combustão em duas zonas possibilita a predição das reações da mistura e a formação dos produtos, em cada instante, em função do ângulo do virabrequim.

Figura 23 - Desenvolvimento da frente de chama em motores SI



Fonte: Adaptado de Heywood (2018)

A primeira lei da termodinâmica é utilizada separadamente para a zona de gases queimados e não queimados, respectivamente, conforme as Equações 43 e 44:

$$\frac{d(m_b \cdot u_b)}{d\theta} = -p_c \cdot \frac{dV_b}{d\theta} + \frac{dQ_F}{d\theta} - \sum \frac{dQ_{Wb}}{d\theta} + h_u \cdot \frac{dm_b}{d\theta} - h_{BB,b} \cdot \frac{dm_{BB,b}}{d\theta} \quad (43)$$

$$\frac{d(m_{bu} \cdot u_u)}{d\theta} = -p_c \cdot \frac{dV_u}{d\theta} + \frac{dQ_F}{d\theta} - \sum \frac{dQ_{Wu}}{d\theta} + h_u \cdot \frac{dm_u}{d\theta} - h_{BB,u} \cdot \frac{dm_{BB,u}}{d\theta} \quad (44)$$

O índice *b*, na equação, representa a zona de gases queimados e o *u*, a zona de gases não queimados. O termo $h_u \cdot \frac{dm_u}{d\alpha}$, considera o fluxo de entalpia da zona de gases não queimados para a zona de gases queimados e esse modelo de duas zonas despreza o fluxo de calor entre as zonas.

É considerado que a soma das taxas de variações do volume de cada uma das zonas é igual à taxa de variação do volume do cilindro, assim, em cada interação a soma do volume da zona de gás queimado com o volume da zona de gás não queimado é igual ao volume do cilindro (AVL Theory, 2018).

$$\frac{dV_b}{d\theta} + \frac{dV_u}{d\theta} = \frac{dV}{d\theta} \quad (45)$$

$$V_b + V_u = V \quad (46)$$

Onde:

V_b Volume de gases queimados [m³];

V_u Volume de gases não queimados [m³];

V Volume total [m³];

Para determinar a taxa de liberação de calor decorrente da queima do combustível, o modelo duas zonas utiliza a correlação semi-empírica de Wiebe (1962) baseado na teoria cinética das reações em cadeia, para determinar a fração de combustível queimada (HEYWOOD, 2018).

$$x = 1 - \exp \left[-a_b \cdot \left(\left(\frac{\alpha - \alpha_{ig}}{\Delta\alpha_b} \right)^{m+1} \right) \right] \quad (47)$$

Onde:

x Fração de combustível queimado [Adimensional];

a_b Parâmetro de eficiência da combustão [Adimensional];

α_{ig} Ângulo de início da combustão [CAD];

$\Delta\alpha_b$ Duração da combustão [CAD];

m Fator de forma da curva de liberação de calor [Adimensional].

Conhecida a fração de combustível queimada, é possível calcular a taxa de liberação de calor pela Equação 48:

$$\frac{dQ_F}{d\theta} = m_f \cdot PCI \cdot \frac{dx}{d\theta} \quad (48)$$

Onde:

- $\frac{dQ_F}{d\theta}$ Taxa de liberação de calor [kW];
 m_f Massa total de combustível [kg];
 $\frac{dx}{d\theta}$ Taxa de queima de combustível [-].

3.4.11 Modelo de detonação Knock Model

O AVL *Boost* não prevê o fenômeno de detonação, porém, o *software* realiza o cálculo para determinar o número de octanas (ON) mínimo requerido para o combustível a ser utilizado sem a ocorrência de detonação, levando em consideração, também, os parâmetros configurados na simulação que representam as condições de operação, a estimativa é realizada pela Equação 49. No primeiro termo dessa equação observa-se que a ocorrência de detonação tem relação com a fase da combustão.

A detonação (*Knock*) é um fenômeno acústico, produzido por colisões entre ondas de pressão decorrentes de ignição espontânea (autoignição) da mistura não queimada. Os gases não queimados são comprimidos pelo pistão e pela propagação da frente de chama, aumentando sua temperatura e pressão conduzindo ao aparecimento da autoignição, que pode ser localizada ou espalhada em mais pontos, conforme Figura 24. A localização destes pontos depende da homogeneidade da mistura e da temperatura (ELMQVIST et al., 2003).

$$ON = 100. \left(\frac{1}{A} \int_{t_{soc}}^{t_{85\%MBF}} \left[\left(\frac{p}{p_{Ref}} \right)^n \cdot \exp \left(- \frac{B}{T_{UBZ}} \right) \right] dt \right)^{\frac{1}{a}} \quad (49)$$

Onde:

ON Número de octanas requerido para o combustível [Adimensional];

p Pressão [atm];

p_{Ref} Pressão de referência [atm];

T_{UBZ} Temperatura da zona não queimada [K];

A Atraso de ignição [ms];

B Constante de temperatura [K];

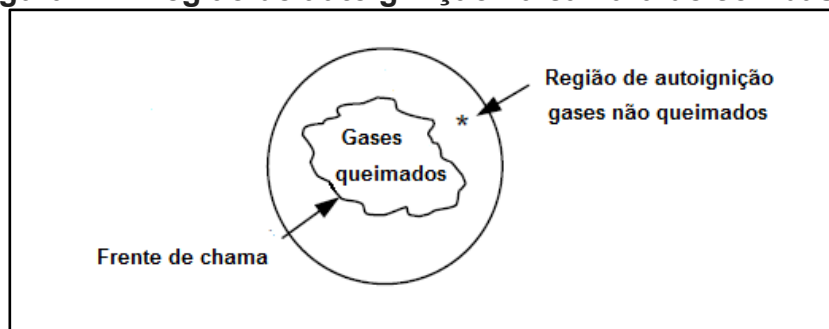
a, n Constantes do modelo, ajustadas experimentalmente [-];

t_{soc} Início da combustão [ms];

$t_{85\%MBF}$ Tempo ate 85% MBF (*Mass Fraction Burned*) [ms].

Com a autoignição ocorrem aumentos excessivos de liberação de calor. Em algumas circunstâncias, essa liberação de calor é tão pequena que não é possível nem sustentar o fenômeno, em outras, podem ser severas a ponto de causar danos ao motor. A ocorrência de detonação depende, ponderadamente, da qualidade de autoignição do combustível, determinado pelo seu número de ON. Outro ponto importante que pode ser observado, e que influencia o desempenho do motor, é a seleção do combustível e a determinação da razão de compressão volumétrica (ELMQVIST et al., 2003).

Figura 24 - Região de autoignição na câmara de combustão



Fonte: Adaptado de Elmqvist et al., (2003).

Na ausência de modelos que sejam capazes de prever o fenômeno de detonação, o que pode ser feito é observar a temperatura simulada na zona dos gases não queimados. Essa temperatura é calculada assumindo que o ciclo de compressão é adiabático e negligenciando a transferência de calor entre zona queimada e não queimada. Quando a temperatura excede um determinado valor altera-se a fase da combustão (ELMQVIST et al., 2003).

Para motores SI com injeção indireta o *Knock Model* calcula o ON requerido mínimo para a operação do motor livre de detonação. A detonação ocorrerá se excedido a igualdade da Equação 50:

$$\int_0^{t_{knock}} \frac{1}{\tau} dt = 1 \quad (50)$$

Onde:

t_{knock} Tempo entre o início da compressão e ocorrência de autoignição [ms];

τ Atraso de ignição [ms].

Elmqvist et al. (2003) observaram em trabalho experimental que acima de 93% de massa queimada não houve ocorrência de *Knock* e propuseram que a quantidade de massa não queimada, no início da ocorrência de *knock*, está entre 10 e 20%. Assim, recomendou-se adicionar essa condição ao modelo para operação livre de ocorrência de *Knock*: o valor da integral da Equação 50 deve ser igual a 1 (um) antes de 93% de MBF.

O atraso de ignição (τ) na zona de gases não queimados é maior que o atraso que havia antes do final da combustão. O atraso de ignição para o *Knock Model* depende do ON do combustível e da condição do gás, de acordo com a Equação 51 (AVL THEORY, 2018):

$$\tau = A \cdot \left(\frac{ON}{100}\right)^a \cdot p^{-n} e^{\frac{B}{T_{UBZ}}} \quad (51)$$

Adicionalmente, Elmqvist et al. (2003) observam que quando se avalia o conceito de um motor novo, é importante que as simulações sejam as mais realísticas

possível, pois produzir dados que sejam impossíveis de serem reproduzidos experimentalmente, em função da ocorrência de *Knock*, são de aplicação limitada.

3.5 Formação de poluentes

O BOOST® permite a simulação quasi-dimensional da combustão e previsão de emissões de poluentes. Trabalha com mecanismos de reações e de cinética química, desacoplados, desconsiderando as reações mais lentas, o que confere ao *software* boa capacidade de prever emissões.

3.5.1 Formação de óxidos de nitrogênio

Óxido de nitrogênio NO_x é calculado pela somatória das emissões de óxido nítrico (NO) e dióxido de nitrogênio (NO₂). Porém, a fração de emissão de óxido nítrico, em motores CI, é maior e resultante da oxidação em altas temperaturas do nitrogênio (N₂), principal reação do mecanismo de formação de NO (MELO, 2012).

O BOOST baseia-se no modelo de Pattas e Häfner (1973) para cálculo de NO_x. O modelo utiliza seis reações do mecanismo estendido de *Zeldovich*, Tabela 6:

Tabela 6 - Reações de formação de NO_x

REAÇÕES		TAXA $k_i = k_{0i} \cdot T^{a_i} \cdot \exp\left(\frac{-T_{Ai}}{T}\right)$	k ₀ [cm ³ /mol.s]	a _i [-]	T _{Ai} [K]
r1	$N_2 + O = NO + N$	$r_1 = k_1 \cdot C_{N_2} \cdot C_O$	$4,93 \times 10^{13}$	0,0472	38048,01
r2	$O_2 + N = NO + O$	$r_2 = k_2 \cdot C_{O_2} \cdot C_N$	$1,48 \times 10^8$	1,5	2859,01
r3	$N + OH = NO + H$	$r_3 = k_3 \cdot C_{OH} \cdot C_N$	$4,22 \times 10^{13}$	0,0	0,0
r4	$N_2O + O = NO + NO$	$r_4 = k_4 \cdot C_{N_2O} \cdot C_O$	$4,58 \times 10^{13}$	0,0	12130,6
r5	$O_2 + N_2 = N_2O + O$	$r_5 = k_5 \cdot C_{O_2} \cdot C_{N_2}$	$2,25 \times 10^{10}$	0,825	50569,7
r6	$OH + N_2 = N_2O + H$	$r_6 = k_6 \cdot C_{OH} \cdot C_{N_2}$	$9,14 \times 10^7$	1,148	36190,66

Fonte: Adaptado de AVL Theory (2018)

Onde:

T	Temperatura do gás [K];
T_{Ai}	Temperatura equivalente a cada reação [K];
k_i	Taxa de reação (para i variando de 1 a 6) [mol/cm ³ s];
$k_{0,i}$	Constante da taxa de reação [mol/cm ³ s];
Ai	Temperatura da zona não queimada [K];
ai	Constantes equivalente a cada reação [Adimensional];
i	Indexador variando de 1 a 6 [Adimensional];
r	Taxa de reação variando de 1 a 6 [mol/cm ³ s];
C	Concentração molar de cada reagente em condição de equilíbrio [mol/cm ³ s];

Para o cálculo da concentração de N₂O a Equação 52 é utilizada:

$$C_{N_2O} = 1,1802 \cdot 10^{-6} \cdot T^{0,6125} \cdot \exp^{\frac{9471,6}{T}} \cdot C_{N_2} \cdot \sqrt{C_{O_2}} \quad (52)$$

A taxa de produção/degradação é determinada pela Equação 53:

$$r_{NO} = NO_{POST} \cdot NO_{MULT} \cdot 2,0 \cdot (1 - \alpha^2) \cdot \frac{r_1}{1 + \alpha \cdot Ak_2} \cdot \frac{r_4}{1 + Ak_4} \quad (53)$$

O cálculo das variáveis α_n , Ak_2 , Ak_4 é obtido pelas equações (54, 55 e 56):

$$\alpha = \frac{C_{NO,act}}{C_{NO,equ}} \cdot \frac{1}{NO_{MULT}} \quad (54)$$

$$AK_2 = \frac{r_1}{r_2 + r_3} \quad (55)$$

$$AK_4 = \frac{r_4}{r_5 + r_6} \quad (56)$$

Onde:

NO_{POST} Parâmetro do *Boost* para ajuste da cinética da produção e degradação de NO [adimensional];

NO_{MULT} Parâmetro do *Boost* que atua na taxa de formação de NO [adimensional];

$C_{NO,act}$ Concentração de NO atual [%];

$C_{NO,equ}$ Concentração de NO de equilíbrio [%].

De acordo com Melo (2012), as constantes do *Boost* (NO_{POST} e NO_{MULT}) são utilizadas para ajuste da concentração de NO_x durante a simulação. Em motores SI, a taxa de formação de N_2O é muito pequena e os valores calculados pelo *Boost* de NO se aproxima a valores calculados pelo mecanismo de *Zeldovich*.

3.5.2 Formação de Monóxido de Carbono

A formação de monóxido de carbono (CO), em motores a ignição por centelha, ocorre em função do A/F. Para misturas mais ricas a oferta de oxigênio é menor levando a uma combustão incompleta e conseqüente aumento de emissões de monóxido de carbono (HEYWOOD, 2018).

A formação de CO, para etanol com elevados índices de hidratação, é afetada em função da alteração da cinética química de formação pela presença da água. A forma como as emissões de CO tendem a variar com o índice de hidratação é objeto deste estudo e será avaliado nos resultados após as simulações.

As reações do modelo de emissões de CO, utilizados pelo BOOST, são apresentadas na Tabela 7 e foram baseadas no estudo de Onorati et al., (2001), (AVL Theory, 2018).

Tabela 7 - Modelo de formação de CO

REAÇÃO ESTEQUIOMÉTRICA	TAXA DE PRODUÇÃO
r1 $CO + OH = CO_2 + H$	$r_1 = 6,76 \times 10^{10} \exp(T/1102) \cdot C_{CO} \cdot C_{OH}$
r2 $CO + O_2 = CO_2 + O$	$r_2 = 2,51 \times 10^{12} \exp(-24055/T) \cdot C_{CO} \cdot C_{O_2}$

Fonte: Adaptado de AVL Theory (2018).

A taxa de formação/degradação de CO é calculada pela Equação 57:

$$r_{CO} = CO_{POST} \cdot (r_1 + r_2) \cdot (1 - \alpha) \quad (57)$$

Onde:

- r_{CO} Taxa de formação/degradação de CO [mol/cm³s];
 CO_{POST} Parâmetro do *Boost* para ajuste da cinética da produção e degradação de CO [Adimensional];
 r , Taxa de reação [mol/cm³s].

O parâmetro α é definido pela Equação 58:

$$\alpha = \frac{C_{CO,act}}{C_{CO,equ}} \quad (58)$$

Onde:

- α Relação [Adimensional];
 $C_{CO,act}$ Concentração de CO atual [%];
 $C_{CO,equ}$ Concentração de CO de equilíbrio [%].

3.5.3 Formação de Hidrocarbonetos não queimados

A formação de hidrocarbonetos não queimados em um motor com ignição por centelha é causada por diferentes fatores. As principais fontes relacionadas à emissão de hidrocarbonetos são (HEYWOOD, 2018):

1. Devido a frações de combustível que penetram em pequenas cavidades da câmara de combustão e não queimam, devido ao resfriamento da chama;
2. Devido ao vapor de combustível absorvido pelo óleo depositando-se nas paredes do cilindro;
3. Devido as finas camadas de combustível que permanecem na câmara de combustão porque a chama se extingue antes de atingir às paredes do cilindro;
4. Devido à queima parcial ou falha de ignição;
5. Devido a passagem direta de vapor de combustível para o sistema de exaustão durante ocasional sobreposição de válvulas.

a) Hidrocarbonetos em cavidades

O modelo assume que a pressão no cilindro é a mesma nas cavidades e que os espaços nas cavidades são totalmente preenchidos pelo combustível. A temperatura do pistão é a mesma para todo o volume. A massa (kg) alojada nas cavidades ($m_{crevice}$) é determinada pela Equação 59:

$$m_{crevice} = \frac{p_c \cdot V_{crevice} \cdot M}{R \cdot T_{piston}} \quad (59)$$

Onde:

$V_{crevice}$	Volume total das cavidades [m ³];
p_c	Pressão no cilindro [Pa];
M	Massa molecular do combustível não queimado [kmol];
R	Constante universal dos gases [kJ/kmol.k];

T_{piston} Temperatura do pistão [K].

b) Mecanismo de absorção e liberação de hidrocarbonetos

Durante a combustão, a concentração de vapor nos gases queimados é nula. O vapor de combustível absorvido pelo óleo lubrificante é liberado compondo os gases queimados.

c) Queima parcial

Os efeitos de resfriamento de camada e de queimas parciais podem ser fisicamente descritos em possível correlação semi-empírica proposta por Lavoie et al. (1980). A fração de carga não queimada remanescente (FC_{un}) é calculada através da Equação 60, relacionando parâmetros de taxa global de queima, Equações 61 e 62.

$$FC_{un} = HC_{PARTIAL} \cdot C1 \cdot \exp\left(-\frac{\theta_{EVO} - \theta_{90\%MFB}}{C2 \cdot (\theta_{90\%MFB} - \theta_{0\%MFB})}\right) \quad (60)$$

$$C1 = 0,0032 + \frac{(\phi - 1)}{22} \quad \phi < 1 \quad (61)$$

$$C1 = 0,0032 + ((\phi - 1) \times 1,1^4) \quad \phi > 1 \quad (62)$$

Onde:

$HC_{PARTIAL}$ Parâmetro do Boost para ajuste da formação de hidrocarbonetos pela queima parcial [Adimensional];

$C2$ Valor padrão Boost = 0.35 [Adimensional];

ϕ Razão estequiométrica de equivalência [Adimensional];

θ_{EVO} Ângulo de abertura da válvula de exaustão [°CA];

$\theta_{0\%MFB}$ Ângulo de 0% de MFB [°CA];

$\theta_{90\%MFB}$ Ângulo de 90% de MFB [°CA].

d) Pós-oxidação de hidrocarbonetos

Os hidrocarbonetos liberados junto aos gases queimados são submetidos a um processo de oxidação devido às altas temperaturas na câmara de combustão. Uma aproximação para calcular o processo foi proposta por Lavoie e Blumberg, (1980), usando a equação de Arrhenius que considera a oxidação lenta de HC. A taxa de hidrocarbonetos que se degradam no mecanismo de pós oxidação $\left(\frac{dC[HC]}{dt}\right)$ é calculada pela Equação 63:

$$\frac{dC[HC]}{dt} = -HC_{MULT} \cdot HC_{POST} \cdot 7,7 \times 10^{12} \cdot \exp\left(\frac{-18790}{T}\right) \cdot C_{O_2} \cdot C_{HC} \quad (61)$$

Onde:

C Concentração molar [kmole/m³];

HC_{MULT} Multiplicador do mecanismo de pós-oxidação [Adimensional];

HC_{POST} Fator de escala para o mecanismo de pós-oxidação [Adimensional];

T Temperatura [K].

De acordo com Melo (2012), HC_{POST} é um fator de ajuste que atua reduzindo as emissões de HC, corrigindo valores superestimados pelo cálculo de emissões nas cavidades e de outros mecanismos de formação.

4 METODOLOGIA

Nesse capítulo são apresentados os recursos, os dados experimentais utilizados para a validação do trabalho, as etapas de parametrização do modelo numérico e a descrição da modelagem utilizada para caracterização da aplicação de um biocombustível a um motor originalmente do ciclo Diesel, convertido para operar no ciclo Otto. A modelagem numérica foi adotada para avaliar os efeitos da variação da razão de compressão volumétrica e da hidratação do combustível, observando-se o desempenho e as emissões.

No modelo numérico e no aparato experimental, o etanol é injetado indiretamente na câmara de combustão, inicialmente na forma comercial: EHC 7% água (v/v) e, adicionadas ao EHC, frações de 10% a 40% de água (v/v) com incrementos de 10%. Cada mistura foi elaborada utilizando o próprio *software* AVL *Boost* e nomeada, respectivamente, de acordo com a Tabela 8:

Tabela 8 - Misturas de etanol sobre-hidratado utilizadas

COMBUSTÍVEL		COMPOSIÇÃO
EHC	Comercial	93% de etanol (v/v) e 7% água (v/v)
EHC	17	83% de etanol (v/v) e 17% água (v/v)
EHC	27	73% de etanol (v/v) e 27% água (v/v)
EHC	37	63% de etanol (v/v) e 37% água (v/v)
EHC	47	53% de etanol (v/v) e 47% água (v/v)

Fonte: Dados da pesquisa

A razão volumétrica de compressão foi variada de acordo com a faixa sugerida por Heywood (2018), que propôs para motores CI valores de 14:1 a 22:1. Para o autor, razões de compressão volumétrica acima de 22:1 não são viáveis devido a ocorrência de diminuição no rendimento térmico em função das perdas pelas “fendas” (*crevices*).

4.1 Lista de materiais

Para a simulação foi utilizado um microcomputador, Dell®, OPTIPLEX 5040, processador Intel®, Core i5®, 2.6GHz de frequência e memória RAM DDR3 de 8GB. Sistema operacional Windows® 7 Professional, 64bits.

O *software* utilizado para a análise numérica foi o AVL *BOOST*® versão 2017. Essa ferramenta numérica permitiu a construção de um modelo quase-dimensional, utilizando o submodelo *Vibe* duas zonas para avaliação da combustão e que possibilitou a previsão de níveis de emissões e desempenho para as configurações propostas.

O tempo médio utilizado para realizar o plano de simulações foi de aproximadamente 96 horas.

4.2 O motor a combustão interna base

O modelo computacional foi elaborado de acordo com as características do motor utilizado no estudo experimental, e parametrizado de forma a comportar-se de maneira semelhante para haver a possibilidade de validação.

O motor utilizado como referência para construção do modelo numérico é um MWM, originalmente do ciclo Diesel, modelo D-229, 4 cilindros em linha, naturalmente aspirado e injeção direta de combustível. Os dados são apresentados na Tabela 9.

Este motor é um equipamento do laboratório do Centro de Pesquisa em Motores, Emissões e Combustíveis - CPMEC - do Instituto Politécnico da Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais.

Tabela 9 - Dados do motor base

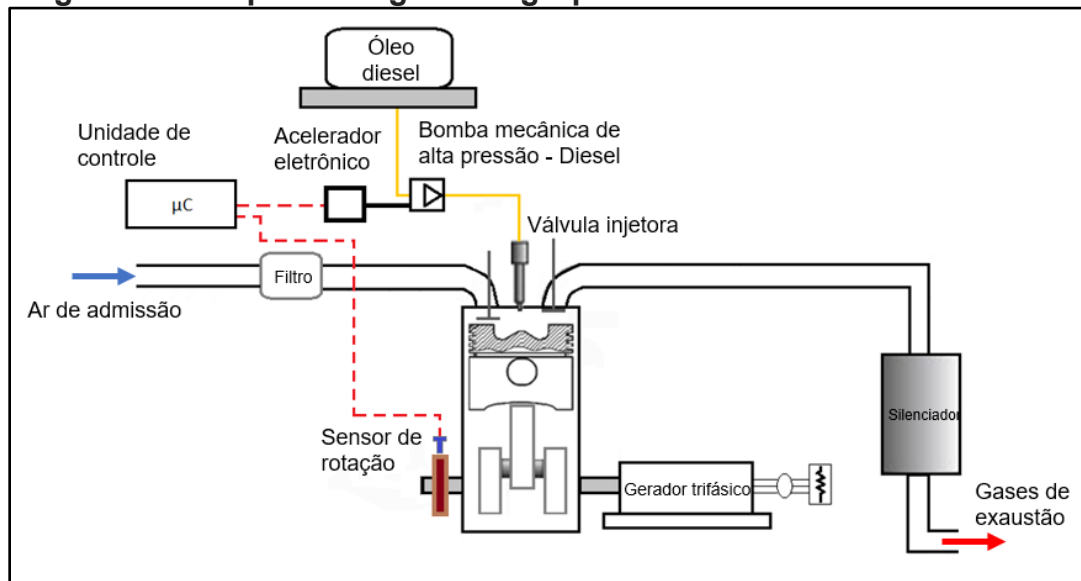
PARÂMETRO	DESCRIÇÃO
Fabricante	MWM
Modelo	D229-4
Potência @ 1800 RPM	49 kW
Construção	Diesel - 4 tempos em linha
Injeção	Direta
Ignição	1-3-4-2
Diâmetro × curso	0,102 m × 0,120 m
Biela	207 mm
Cilindrada unitária	0,980 litros
Número de cilindros	4
Cilindrada total	$3,922 \times 10^{-3} \text{ m}^3$
Aspiração	Natural
Razão de compressão	17:1
Início da injeção	33°CA APMS
Abertura válvula exaustão	510° CA DPMS
Fechamento válvula admissão	210° CA DPMS
Abertura válvula admissão	0° CA DPMS
Fechamento válvula exaustão	720° CA DPMS

Fonte: Manual de oficina MWM (2005)

4.2.1 O trabalho experimental

O motor MWM do ciclo Diesel utilizado no aparato experimental tem aplicação estacionária acionando um gerador de energia elétrica trifásico, de quatro polos, 220V, frequência de 60Hz e potência útil nominal de 55kW.

A Figura 25 apresenta a configuração e aplicação original do motor a um grupo Motor-Gerador:

Figura 25 - Esquema original do grupo Motor-Gerador no ciclo Diesel

Fonte: Adaptado de Justino (2018)

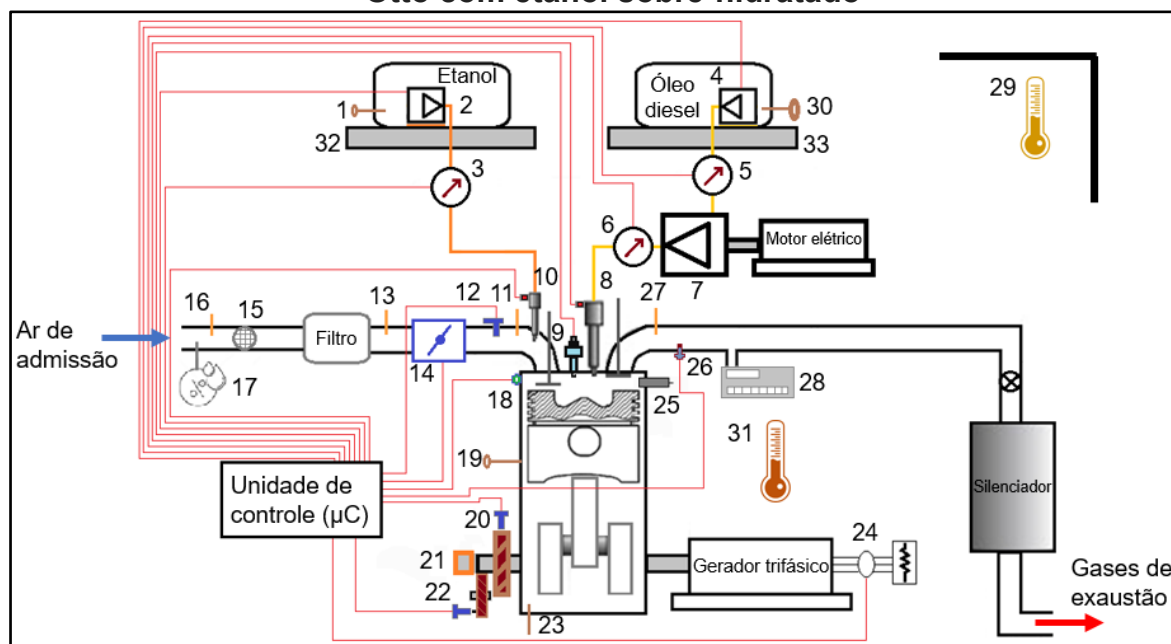
Alterações do motor MWM foram necessárias para execução do trabalho experimental e realizadas por Justino (2018) e Moreira (2018). Para a operação no Ciclo Diesel, o sistema de injeção de óleo diesel original foi substituído por um sistema *Common Rail* de injeção eletrônica (Bosch FPT F1A).

Para o ciclo Otto, como observa-se na Figura 26, adaptou-se uma válvula borboleta antes do duto de admissão do motor MWM (14). Foram adaptados, também, um sistema de injeção indireta de etanol, etanol sobrehidratado tipo *Common Rail* e válvulas tipo eletroinjetoras de combustível. Os eletroinjetores (10) foram posicionados nos dutos de admissão, individualmente, correspondentes a cada cilindro, trabalhando com pressão de 4,5 bar. Velas de ignição (9) foram instaladas no cabeçote do motor.

A construção do modelo numérico, elaborado para simulação da operação do motor no ciclo Otto, utilizou construções numéricas semelhantes. Uma válvula borboleta foi posicionada no duto de admissão e injetores foram inseridos nos dutos de admissão de cada cilindro de acordo com a posição no modelo físico. O modelo numérico não utiliza vela de ignição, mas é necessário informar o início e duração da combustão.

Na Tabela 10 são apresentados os componentes adaptados ao grupo Motor-Gerador adaptado para operação no ciclo Otto.

Figura 26 - Esquema do grupo Motor-Gerador adaptado para operar no ciclo Otto com etanol sobre-hidratado



Fonte: Adaptado de Justino (2018)

Tabela 10 - Componentes do grupo Motor-Gerador adaptado para operar no ciclo Otto

1	Termopar: etanol do reservatório	17	Termohigrômetro
2	Bomba de baixa pressão (etanol)	18	Termoresistor: líquido de arrefecimento (controle)
3	Sensor de pressão (Baixa pressão etanol)	19	Termoresistores
4	Bomba de baixa pressão (biodiesel)	20	Sensor de rotação (magnético) e roda fônica
5	Sensor de pressão (Baixa pressão biodiesel)	21	Encoder
6	Sensor de pressão (Alta pressão biodiesel)	22	Sensor de fase
7	Bomba de alta pressão (biodiesel)	23	Termopar: óleo do cárter
8	Válvula injetora de biodiesel	24	Transdutor de grandezas elétricas
9	Vela de ignição	25	Sensor de pressão da câmara de combustão
10	Válvula injetora de etanol	26	Sonda Lambda
11	Termopar: ar após a válvula borboleta	27	Termopar: gás de exaustão
12	Sensor TMAP	28	Analisador de gases da exaustão
13	Termopar: ar após o filtro	29	Barômetro: pressão atmosférica
14	Válvula borboleta	30	Termoresistor: óleo diesel do reservatório
15	Sensor de vazão mássica do ar admitido	31	Termopar: ambiente na região do motor
16	Termopar: ar da admissão	32	Balança do reservatório de etanol
17	Termohigrômetro	33	Balança do reservatório de óleo diesel

Fonte: Adaptado de Justino (2018)

4.2.2 Os dados experimentais

O trabalho experimental de Moreira (2018) o qual realizou a avaliação do motor original do ciclo Diesel, convertido e operando com etanol sobrehidratado no ciclo Otto, gerou dados de emissões e desempenho que foram utilizados para validação do modelo numérico, antes da simulação proposta.

Os dados experimentais de desempenho e incertezas são dispostos na Tabela 11.

Tabela 11 - Dados experimentais de desempenho do Motor MWM 229/4 carga 35kW @1800rpm, operando no ciclo Otto com etanol sobre-hidratado

Comb.	Vazão Massica de ar [kg/h]		Vazão Massica de combustível [kg/h]		SFC [kg/kW.h]		Eficiência Global [%]		Temperatura de Exaustão [°C]	
	Valor	Incert.	Valor	Incert.	Valor	Incert.	Valor	Incert.	Valor	Incert.
B8	196,28	4,79	8,86	0,13	0,2621	0,0001	32,53	1,74	561,2	9,7
EHC	135,14	2,12	15,08	0,09	0,4510	0,0001	32,47	0,53	615,7	3,5
EHC17	135,18	2,02	17,04	0,19	0,5100	0,0002	32,74	0,79	608,7	5,7
EHC27	137,49	5,64	19,10	0,12	0,5720	0,0001	33,78	0,51	602,7	9,7
EHC37	136,37	2,30	22,60	0,21	0,6767	0,0002	33,43	0,57	586,0	4,7
EHC47	140,44	2,73	27,02	0,28	0,8096	0,0003	34,14	0,58	571,3	4,1

Fonte: Adaptado de Moreira (2018)

Os dados experimentais de emissões e incertezas são mostrados na Tabela 12.

Tabela 12 - Dados experimentais de emissões do Motor MWM 229/4 carga 35kW @1800rpm, operando no ciclo Otto com etanol sobre-hidratado

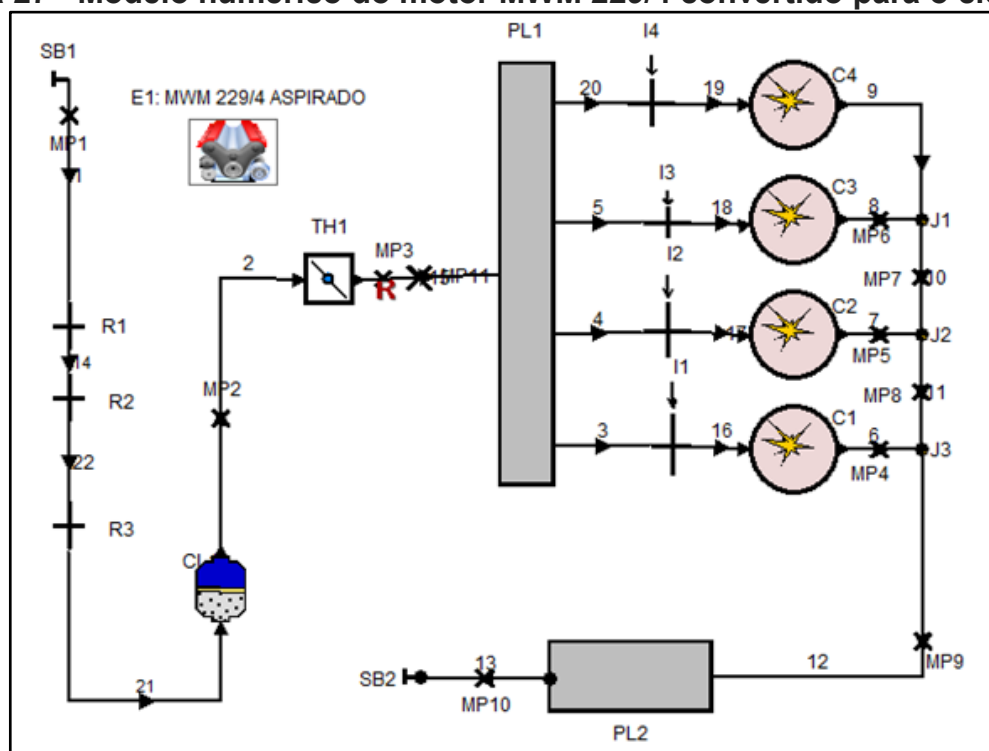
Combustível.	Emissões CO [g/kW.h]		Emissões HC [g/kW.h]		Emissões NO _x [g/kW.h]	
	Valor	Incert.	Valor	Incert.	Valor	Incert.
B8	16,6	0,2	0,4432	0,0130	5,49	0,12
EHC	46,6	8,3	0,5515	0,0117	9,69	0,03
EHC17	37,0	5,2	0,8988	0,0307	9,83	0,03
EHC27	32,3	4,1	1,1058	0,0476	9,89	0,05
EHC37	35,9	5,0	1,8381	0,1306	7,29	0,02
EHC47	21,1	1,7	3,0611	0,3614	7,99	0,02

Fonte: Adaptado de Moreira (2018)

4.3 O modelo numérico e a parametrização

O modelo numérico é construído selecionando os elementos, na tela principal do AVL *Boost*, que correspondem aos componentes do motor. Os elementos são conectados através de linhas, as quais representam os dutos do sistema de admissão e exaustão. As medições *in loco* foram necessárias para levantar as características geométricas dos dutos, auxiliando na construção do modelo apresentado na Figura 27:

Figura 27 - Modelo numérico do motor MWM 229/4 convertido para o ciclo Otto



Fonte: Elaborado pelo autor

O modelo numérico da Figura 27 foi elaborado para a simulação proposta do trabalho e de acordo com as alterações para conversão entre ciclos realizadas no trabalho experimental. Para a análise numérica foram feitas as seguintes alterações:

1. adaptação da válvula “borboleta” TH1 (*throttle valve*) no duto de admissão para controle da perda de carga;
2. configuração dos injetores nos dutos de admissão de cada cilindro de admissão para injeção indireta de combustível.

Na Tabela 13 são descritos os símbolos e os componentes do modelo numérico da Figura 27:

Tabela 13 - Componentes do grupo Motor-Gerador

SÍMBOLO	DESCRIÇÃO
E	Identificação do modelo numérico
C	Cilindro: São informados dados geométricas, parâmetros de combustão e dos modelos de emissões, seleção do modelo de transferência de calor, abertura das válvulas e etc.
I	Injetores
SB	Condições de contorno
PL	Volume ou <i>Plenum</i>
MP	Pontos de medição
J	Junções de dutos
R	Reduções de seção
Números	Identificação de cada componente havendo mais que uma unidade

Fonte: Elaborado pelo autor

4.3.1 Parametrização dos dutos de admissão e exaustão

Os dutos do sistema de admissão e exaustão apresentados na Figura 28, possuem características dimensionais e construtivas distintas e estão relacionadas na Tabela 15, de acordo com o número de cada seção observados na Figura 29:

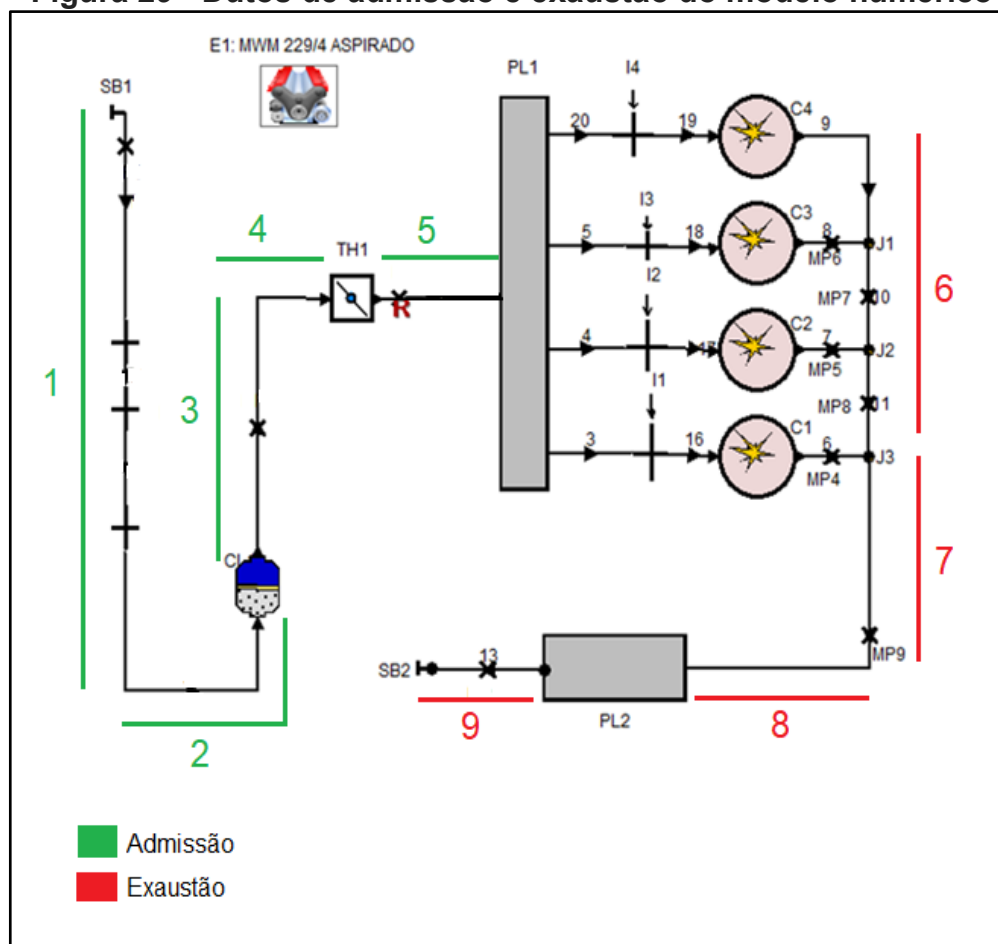
Figura 28 - Dutos de exaustão e admissão do grupo Motor-Gerador



Fonte: Brito (2016)

Identificação do sistema de admissão e exaustão e número de identificação de cada seção, apresentado na Figura 29.

Figura 29 - Dutos de admissão e exaustão do modelo numérico



Fonte: Elaborado pelo autor

As medidas correspondentes a cada seção dos dutos do sistema de admissão e exaustão estão relacionadas na Tabela 14:

Tabela 14 - Relação dos dutos de admissão e exaustão

Duto (número)	Comprimento (mm)	Diâmetro (mm)
1	2400	100
2	2500	75
3	1800	75
4	200	75
5	200	75
6	800	100
7	1370	100
8	200	100
9	7500	100

Fonte: Dados da pesquisa (2018)

4.3.2 Parâmetros dos combustíveis

Os combustíveis utilizados na simulação são formulados no próprio AVL *Boost*, utilizando a ferramenta *Gas Properties Tool*. Para o cálculo das frações volumétricas são inseridos os dados da massa específica, para cada componente do combustível, e a fração volumétrica, como exemplo de elaboração do EHC47 no Anexo B.

Os combustíveis utilizados no modelo numérico são formulados conforme a composição volumétrica dos combustíveis utilizados no trabalho experimental de Moreira (2018). Os combustíveis formulados resultaram da sobrehidratação do etanol hidratado combustível (7% de água v/v) com incrementos de 10% (v/v) e com suas características apresentadas na Tabela 15:

Tabela 15 - Representação das espécies de combustíveis

Comb.	Composição (v/v)		Cálculado		Dados de Simulação		
	Etanol [%]	Água [%]	Fração Combust. Vaporizado	PCI [kJ/kg]	A/F [-]	PCI [kJ/kg]	Dif. [%]
B8	-	-	-	-	15,1694	42.830	-
EAC	99	1	0,1116	26.800	8,9536	27.614	2,95
EHC	93	7	0,1216	24.920	8,2244	25.366	1,76
EHC17	83	17	0,1395	21.560	7,1636	22.095	2,40
EHC27	73	27	0,1625	18.630	6,1526	18.978	1,85
EHC37	63	37	0,1927	15.910	5,1880	16.004	0,60
EHC47	53	47	0,2343	13.030	4,2666	13.163	1,00

Fonte: Dados da pesquisa e Moreira (2018)

4.3.2.1 Injeção de combustível

A injeção de combustível foi configurada para ocorrer de forma contínua, externa (PFI) e com o fluxo de massa obedecendo a razão estequiométrica ar/combustível (A/F) de acordo com cada combustível selecionado na simulação. Os valores de A/F são alterados sempre que um novo combustível é selecionado. O injetor cobre até 25% da massa injetada e para a simulação, considerou-se que todo combustível injetado foi vaporizado. Para que esse valor fosse determinado, fez-se o cálculo inverso do A/F, para cada mistura, e determina-se o valor da fração de combustível vaporizado, componente das condições iniciais de contorno.

4.3.3 Parâmetros e condições de contorno

As condições iniciais de temperatura e pressão, e outras condições em casos específicos, foram parametrizadas para que o *software* tenha as condições para início das interações numéricas. A Tabela 16 apresenta as condições iniciais de contorno utilizadas na simulação proposta:

Tabela 16 - Definição das condições iniciais e contorno

Parâmetro	SB1	Seção entre injetor e cilindro	SB2
Pressão (bar)	0,927	0,927	2
Temperatura (°C)	25	25	600
Comb. Vaporizado (-)	0	0,1216 ^a	0
Produtos da Comb.	0	0	1
A/F	1000	8,22*	1000
Coefficiente de Fluxo	0,95	0,95	0,95

*Altera-se o valor para cada combustível selecionado (EHC).

^aAltera-se esse parâmetro para cada combustível, Tabela 10, cálculo inverso do A/F (EHC).

SB1: Condições de contorno nos dutos de admissão.

SB2: Condições de contorno nos dutos de exaustão.

Fonte: Dados da pesquisa

4.3.4 Parametrização do modelo de combustão

Dos modelos disponíveis na biblioteca do AVL *Boost*, foi adotado o modelo de combustão *Vibe duas zonas*, que utiliza a curva de liberação de energia de *Viebe*, dividindo a câmara de combustão em duas zonas: as dos gases queimados e a dos gases não queimados, o que permite o cálculo para estimar a formação de poluentes.

O AVL *Boost* resolve a equação da primeira lei da termodinâmica para cada uma das duas zonas, individualmente, em função do ângulo do eixo do virabrequim, para tal é necessário informar o início (SOC) e a duração da combustão em função de °CA, também os parâmetros “*a*” (fração mássica queimada) e “*m*” (parâmetro de forma da curva da taxa de liberação de calor RORH).

O parâmetro “*a*” indica a quantidade de combustível queimada no intervalo de duração da combustão. A fração de massa queimada, ao final da combustão, será igual a 0,999 para $a = 6,9078$, e a 0,99 para $a = 4,605$. Os valores utilizados para este parâmetro deverão estar na faixa $4,605 < a < 6,9078$. O valor utilizado no trabalho foi de $a = 6,9078$.

Os demais parâmetros (SOC, duração da combustão e parâmetro de forma “*m*”) são obtidos utilizando a curva de pressão experimental do trabalho de Moreira (2018), em simulação diagnóstica através do AVL *Burn*, para obter os parâmetros da curva *Vibe* individualmente para cada combustível.

Os valores obtidos por simulação diagnóstica e utilizados no trabalho são apresentados na Tabela 17:

Tabela 17 - Parâmetros da curva *Vibe* duas zonas para 17:1, 35kW @1800rpm

Comb.	Início da Combustão SOC [°CA]	Duração da Combustão [°CA]	<i>m</i> [-]	<i>a</i> [-]
EHC	-2,49	23,40	2,66	6,9078
EHC17	-3,42	23,70	2,51	6,9078
EHC27	-3,94	26,10	2,26	6,9078
EHC37	-6,77	28,20	2,22	6,9078
EHC47	-6,28	29,70	1,79	6,9078

Fonte: Dados da pesquisa

4.3.5 Parametrização do modelo de Knock

Os parâmetros do modelo de detonação (A , B , n , e a) descritos pela Equação 49 são apresentados na Tabela 19, para cada combustível utilizado na simulação de validação do modelo numérico e na simulação proposta neste trabalho. Esses parâmetros são os sugeridos pelo AVL *Boost* para a modelagem utilizando a gasolina, exceto os valores do parâmetro “ A ”.

Para determinação do parâmetro “ A ” (atraso de ignição) foi utilizado como referência o trabalho experimental de Elqmist et al. (2003) que utilizaram a mistura E94W6 e chegaram ao valor de $A = 21$ ms. O valor anterior sugerido pelo AVL *Boost* para gasolina é de $A = 17$ ms. Os valores das demais configurações foram determinados através de simulação. Os valores do atraso de ignição e parâmetros do *knock model*, para cada combustível, são apresentados na Tabela 18 em função do °CA.

Tabela 18 - Parâmetros do modelo de detonação para 35kW @1800rpm e razão volumétrica compressão de 17:1

Comb.	SOC Simulado [°CA APMS]	Ângulo exp. de Ignição [°CA APMS]	Atraso de Ignição [°CA APMS]	A [ms]	B [K]	n [-]	a [-]
EHC	2,49	5	2,56	21,0	3800	1,7	3,402
EHC17	3,42	7	3,58	23,0	3800	1,7	3,402
EHC27	3,94	12	8,06	23,5	3800	1,7	3,402
EHC37	6,77	13	6,23	28,0	3800	1,7	3,402
EHC47	6,28	13	6,72	30,0	3800	1,7	3,402

Fonte: Dados da pesquisa

4.3.6 Parâmetros do modelo de transferência de calor

A troca de calor entre os gases no interior do cilindro com as fronteiras foi modelada pelo AVL *Boost* demandando a entrada das seguintes informações:

1. temperatura inicial da superfície interna do cilindro;
2. temperatura inicial da superfície do pistão;
3. área interna da superfície do cilindro;
4. área da superfície do pistão;
5. seleção do modelo utilizado para cálculo do coeficiente de transferência térmica.

Fagundez et al., (2017) avaliaram numericamente quatro correlações de transferência de calor (*Woschni*, *Hohenberg*, *Sitikei* e *Annand*) e os resultados utilizando os modelos de *Hohenberg* e *Woschni*, respectivamente, obtiveram os melhores resultados na estimativa do pico de pressão durante a combustão. No processo de validação do modelo numérico e na predição dos parâmetros de combustão (simulação diagnóstica pelo AVL *Burn*) foram utilizados os modelos de *Woschni* e *Hohenberg* e os resultados destas duas correlações de transferência de calor foram comparados com os dados de experimentais.

4.3.7 Parâmetros dos modelos de formação de poluentes

Durante o processo de validação do modelo numérico, os parâmetros dos modelos de formação de poluentes (NO_x , CO e HC) foram ajustados observando a tendência dos resultados simulados aproximarem-se dos valores experimentais. Diferenças entre valores experimentais e simulados inferiores a 20% foram definidos como margem para validação dos modelos.

4.3.7.1 Parâmetros do modelo de formação de NO_x

Para o cálculo da formação de NO_x (modelo de Pattas e Häfner, 1973) é necessário informar os parâmetros para ajuste do modelo cinético de emissão de NO_x de acordo com a Tabela 19:

1. NO_x Kinetic Multiplier (NO_{MULT}), está relacionado à taxa de formação do poluente;
2. NO_x Postprocessing Multiplier (NO_{POST}), está relacionado a formação ou degradação de NO na fase de expansão e exaustão do cilindro.

Tabela 19 - Parâmetros do modelo de formação de NO_x

PARÂMETRO	VALOR
	[-]
NO_{MULT}	0,53
NO_{POST}	1,20

Fonte: Dados da pesquisa

4.3.7.2 Parâmetros do modelo de formação de CO

Para o cálculo de formação de CO, é necessário informar o parâmetro de ajuste da cinética de produção e degradação de CO (CO_{POST}) com base no modelo de Onorati et al. (2001) apresentado na Tabela 20:

1. *kinetic Multiplier* (CO_{POST}), multiplicador utilizado para produção de CO.

Tabela 20 - Parâmetro do modelo de formação de CO

PARÂMETRO	VALOR
	[-]
CO_{POST}	0,014

Fonte: Dados da pesquisa

4.3.7.3 Parâmetros do modelo de formação de HC

Para o cálculo da formação de hidrocarbonetos (HC), é necessário informar os parâmetros para determinação da fração de carga não queimada, taxa de HC que se degrada com o mecanismo de pós oxidação, medidas das aberturas de fendas e espessura do filme de óleo lubrificante, de acordo com a Tabela 21:

1. HC *Postoxidation multiplier* (HC_{MULT}), parâmetro do mecanismo multiplicador de pós oxidação;
2. HC *Postoxidation* E, f, estão relacionados a correção de formação superestimada em cavidades e outros mecanismos;
3. HC *Partial burn "P"* (HC_{POST}), parâmetro de formação de hidrocarbonetos pela queima parcial;
4. .Abertura e altura da fenda (*crevice gap, height*);
5. Espessura do filme de óleo lubrificante.

Tabela 21 - Parâmetro do modelo de formação de HC

PARÂMETRO	RECOMENDADO	VALOR	
HC_{MULT}	1	0,20	[-]
$HC_{POST E}$	18790	18790	[K]
$HC_{POST f}$	0,3*	0	[-]
NO_{POST}	0	0	[-]
Crev. Gap	0,1-0,2	0,15	[mm]
Crev. Height	5	1,25	[mm]
Filme de óleo	0,005	0,005	[mm]

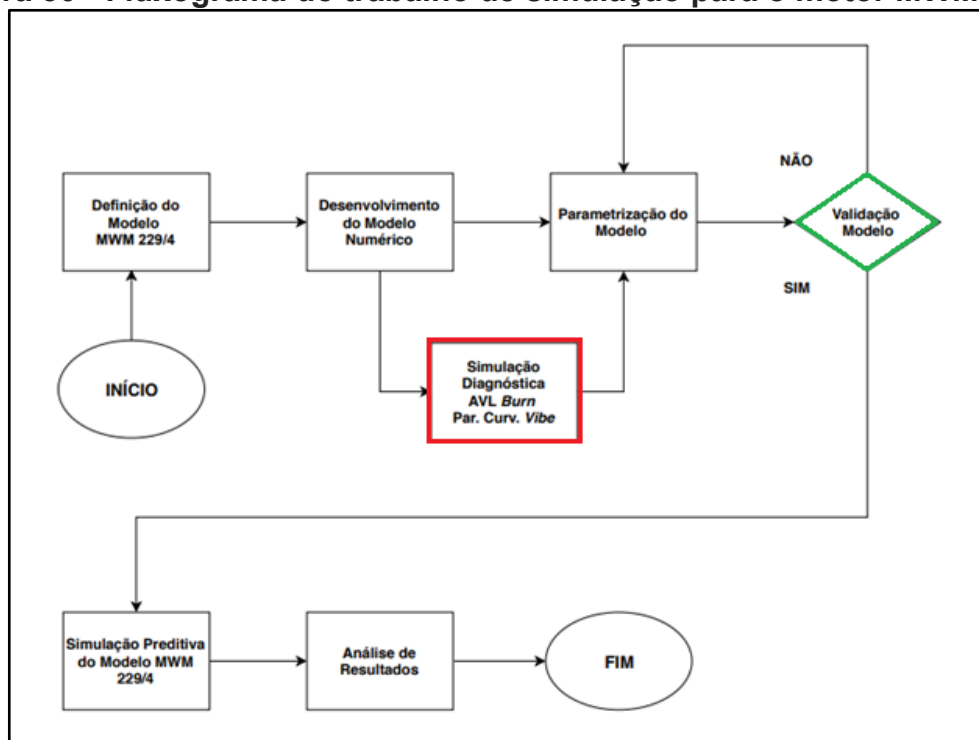
*Significa que somente em 30% da zona queimada as reações de pós-oxidação podem ocorrer

Fonte: Dados da pesquisa

4.4 Simulação numérica do motor MWM operando no ciclo Otto

A análise numérica proposta neste estudo foi realizada de acordo com o fluxograma apresentado na Figura 30:

Figura 30 - Fluxograma do trabalho de simulação para o motor MWM 229/4



Fonte: Elaborado pelo autor

As fases apresentadas no fluxograma do trabalho da simulação preditiva proposta estão descritas na Tabela 22:

Tabela 22 - Descrição das fases do plano de simulação

1	Definido o modelo considerando as características do motor base para o estudo (MWM 229/4).
2	Desenvolvido o modelo numérico de acordo com o motor selecionado utilizando o AVL <i>Boost</i>
3	Simulação diagnóstica utilizando o AVL <i>Burn</i> para obtenção dos parâmetros de combustão.
4	Parametrização do modelo numérico: dimensionamento dos dutos, elaboração dos combustíveis, injeção de combustível, condições de contorno, parâmetros do modelo de combustão, parâmetros do modelo de detonação, parâmetros do modelo de transferência de calor e parâmetros dos modelos de emissões de poluentes.
5	Validação do modelo numérico.
6	Simulação preditiva do modelo numérico para avaliação dos efeitos da razão volumétrica de compressão e da hidratação nas emissões e desempenho do motor base do estudo.
7	Análise dos resultados com base na literatura estudada.

Fonte: Elaborado pelo autor

4.4.1 Simulação diagnóstica utilizando o AVL *Burn*

A simulação diagnóstica forneceu os parâmetros da curva *Vibe* duas zonas para cada combustível que foi utilizado na simulação. O objetivo deste procedimento foi aproximar a curva de pressão simulada da curva experimental. Consequentemente são aproximados, também, os valores dos dados de emissões e desempenho da simulação numérica aos dados experimentais, favorecendo a convergência e validação do modelo.

A simulação diagnóstica utilizando o AVL *Burn* foi elaborada de acordo com o fluxograma apresentado na Figura 31.

Figura 31 - Fluxograma da simulação no AVL Burn



Fonte: Elaborado pelo autor

Os passos para execução da simulação no *Burn* e que seguem a ordem numérica conforme apresentado no fluxograma Tabela 23, são descritos a seguir:

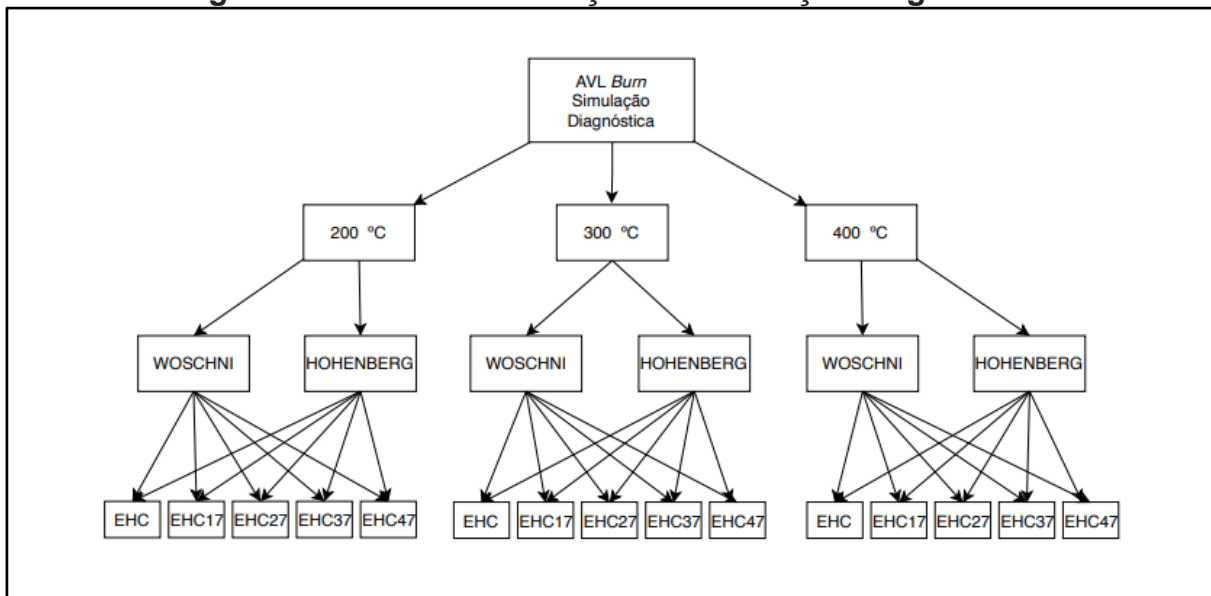
Tabela 23 - Fases do plano de simulação diagnóstica no AVL Burn para 1800rpm, 35kW e razão volumétrica de compressão 17:1

1	São inseridas as características da simulação, identificação do projeto, da combustão, do combustível, AF e PCI.
2	São inseridas as características geométricas e razão volumétrica de compressão do motor.
3	Caracterização termodinâmica do modelo, dimensões das superfícies de troca térmica, temperatura das paredes internas, rotação, vazão mássica de ar e combustível.
4	São inseridos os dados do traço de pressão experimental.
5	O AVL <i>Burn</i> efetua a simulação diagnóstica.
6	Apresentação dos resultados.

Fonte: Elaborado pelo autor

Os passos do procedimento de simulação diagnóstica são refeitos quando há alteração da composição do combustível, da carga ou da razão de compressão volumétrica e temperatura das superfícies. A simulação diagnóstica seguiu o plano de execução mostrado na Figura 32.

Figura 32 - Plano de execução da simulação diagnóstica



Fonte: Elaborado pelo autor

O plano de simulação diagnóstica sugeriu três valores de temperatura interna das paredes da câmara de combustão. Esses valores foram selecionados a partir do valor da temperatura do fluido lubrificante e refrigerante (~95 °C) para o EHC e somados a ele intervalos de 100 °C.

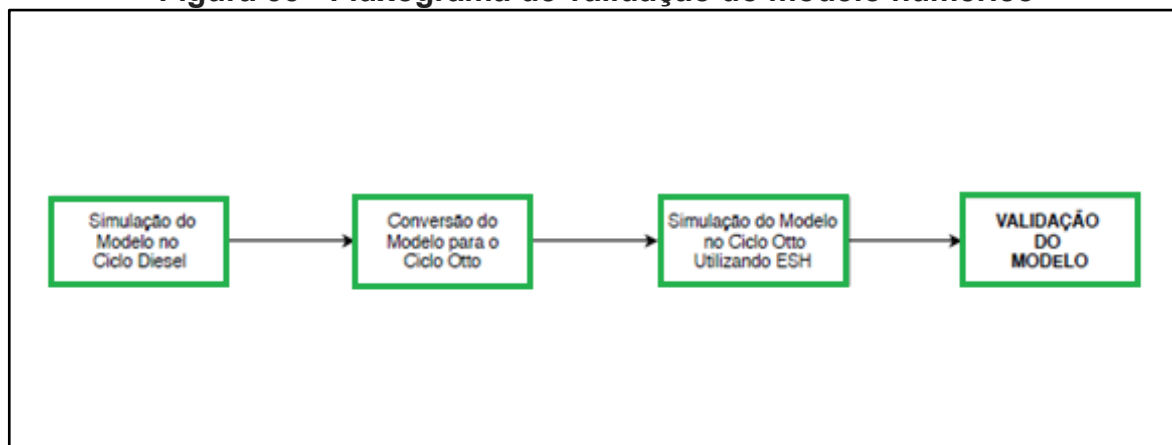
Dois submodelos para determinação do coeficiente de transferência de calor *Hohenberg* e *Woschni* foram simulados. Esses modelos foram selecionados em função dos resultados observados em estudos encontrados na literatura e são os modelos que apresentaram simulações mais próximas do trabalho experimental.

Com o objetivo de obter o melhor resultado para o balanço de energia a simulação diagnóstica utilizou três temperaturas diferentes e dois submodelos de transferência de calor propondo uma avaliação em condições diferentes de operação do motor.

4.4.2 Procedimento de validação

No procedimento de validação buscou-se verificar a fidelidade do modelo numérico quanto às previsões de comportamento do motor através da comparação entre os dados experimentais e os simulados. O fluxograma da Figura 33 apresenta o procedimento de validação.

Figura 33 - Fluxograma de validação do modelo numérico



Fonte: Elaborado pelo autor

O procedimento de validação é uma sub rotina do plano de simulação e foi realizado após a parametrização do modelo numérico, executado de acordo com a Tabela 24:

Tabela 24 - Descrição do procedimento de validação do modelo numérico

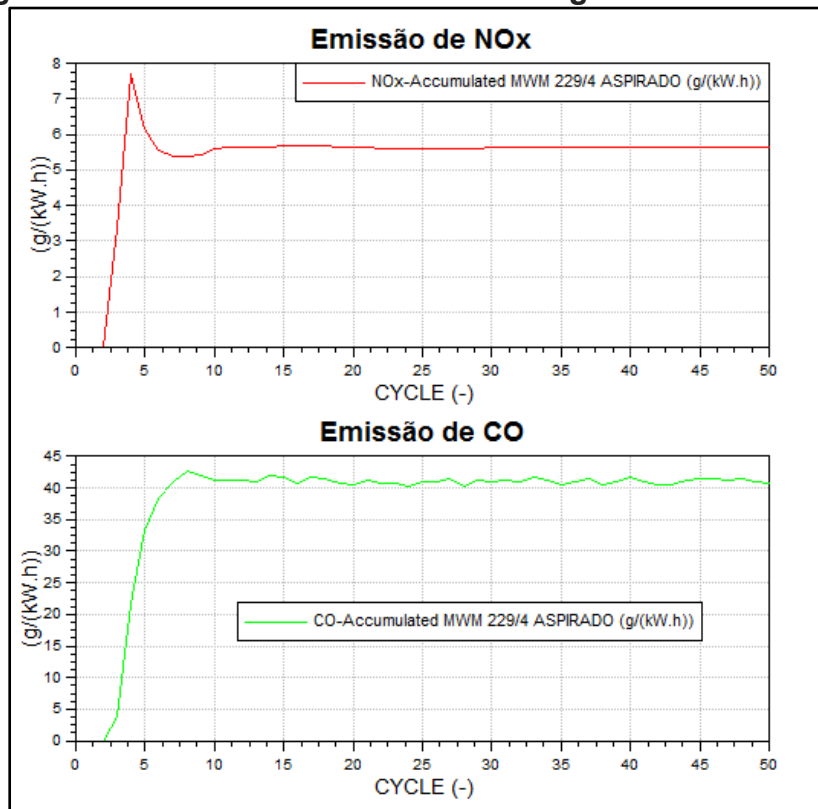
1	Simulação do modelo numérico no ciclo Diesel, mantendo as características originais e avaliação dos submodelos de transferência de calor.
2	Conversão do modelo numérico do ciclo Diesel para o ciclo Otto Inseridos: válvula borboleta, injetores, injeção externa indireta de combustível, seleção de combustível e controle de injeção obedecendo a relação A/F.
3	Simulação do modelo no ciclo Otto, carga de 35kW, 1800rpm e utilizando os combustíveis: EHC, EHC17, EHC27, EHC37 e EHC47.
6	Comparado os resultados do modelo numérico e os dados experimentais de vazão mássica de ar e combustível (\dot{m}_a , \dot{m}_f), consumo específico de combustível (SFC), eficiência global e a potência efetiva. A diferença entre os dados simulados e os experimentais devem ser inferiores a 20% para validação do modelo numérico utilizado no ciclo Otto.

Fonte: Elaborado pelo autor

4.4.3 Critério de validação do modelo numérico operando no ciclo Otto

As simulações começaram com 50 ciclos e observou-se o comportamento das variáveis de interesse verificando se ocorreu a convergência. A curva não apresentando variações, como no exemplo da Figura 34, que a partir do décimo quinto ciclo não apresenta variações, considera-se então que o modelo convergiu. Não havendo convergência, acrescenta-se 25 ciclos e esse procedimento é repetido até ocorrer a convergência da variável observada.

Figura 34 - Gráfico da análise de convergência de CO e NOx



Fonte: Dados da pesquisa

O modelo numérico da simulação preditiva, no ciclo Otto, foi considerado validado quando a diferença percentual entre os dados simulados e experimentais foram menores que 20%.

4.4.4 Definição do plano de simulações

Após a validação do modelo no ciclo Otto, as simulações são executadas conforme o plano de simulação (Tabela 25) e a ordem de simulação é apresentada na Figura 35.

O plano de simulações sugere abranger a faixa de razão volumétrica de compressão entre 17:1 e 22:1, lacuna observada na literatura, a fim de avaliar seus efeitos sobre a eficiência na conversão de combustível e impacto nas emissões.

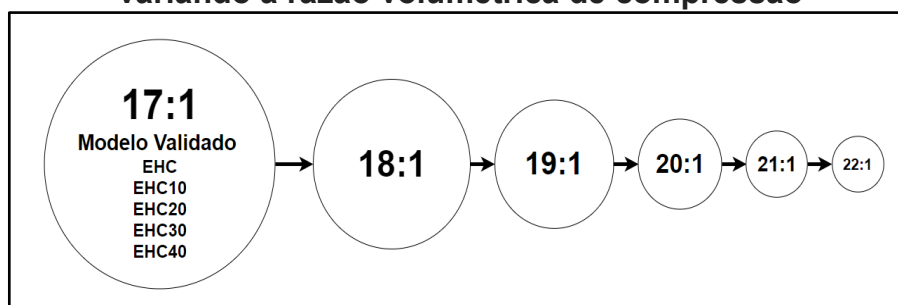
Tabela 25 - Plano de simulações para o trabalho proposto

Combustível	Composição (v/v)		Faixa de variação da Razão Volumétrica de Compressão					
	Etanol (%)	Água (%)	17:1	18:1	19:1	20:1	21:1	22:1
EHC	93	7	17:1	18:1	19:1	20:1	21:1	22:1
EHC17	83	17	17:1	18:1	19:1	20:1	21:1	22:1
EHC27	73	27	17:1	18:1	19:1	20:1	21:1	22:1
EHC37	63	37	17:1	18:1	19:1	20:1	21:1	22:1
EHC47	53	47	17:1	18:1	19:1	20:1	21:1	22:1

Fonte: Elaborado pelo autor (2018).

A simulação seguiu a sequência apresentada na Figura 35, aumentando a razão volumétrica de compressão de 17:1 a 22:1 em acréscimos de um ponto.

Figura 35 - Sequência de simulação do modelo no ciclo Otto, 1800rpm, 35kW variando a razão volumétrica de compressão



Fonte: Elaborado pelo autor

Para a simulação proposta no trabalho, a rotação foi mantida constante (1800rpm) por se tratar de um motor com aplicação estacionária e os dados experimentais obedecerem a esta condição.

Um dos objetivos específicos foi determinar a melhor faixa de eficiência para o motor MWM quando sua operação foi convertida do ciclo Diesel para a operação no ciclo Otto. Uma das ações necessárias para a conversão física entre ciclos termodinâmicos é a instalação de uma válvula borboleta (TH1). A adaptação dessa válvula, por sua vez, tem por consequência a perda de carga na fase de bombeamento e, a baixas cargas, compromete a eficiência do ciclo. Sendo assim, foi eliminada a análise em cargas menores. Moreira (2018) em seu trabalho, ressalta que o motor comportou-se de maneira estável nos ensaios experimentais até a carga de 37,5kW.

Posteriormente, o autor concluiu que o sistema eletrônico de controle do motor, desenvolvido por Justino (2018) e o módulo de controle de rotação, desenvolvido pelo mesmo, para operação no ciclo Otto, apresentaram resultados estáveis nos ensaios experimentais até a carga de 35kW. Em função deste fato, optou-se por efetuar a simulação com a carga constante de 35kW.

A faixa de variação da razão de compressão volumétrica selecionada, deveu-se à faixa sugerida para motores a combustão interna por compressão, proposta por Heywood (2018). Observou-se, ainda, que os testes experimentais realizados por Cró (2013) apontaram poucas vantagens no aumento da razão de compressão acima de 21 que observou perdas térmicas em aberturas e fendas (*Crevices*).

5 RESULTADOS

Os resultados obtidos são apresentados neste capítulo conforme a sequência do fluxograma mostrado na Figura 30 do capítulo 4.4. Primeiro são discutidos os resultados da análise diagnóstica realizada para obtenção dos parâmetros utilizados no modelo de combustão da simulação. Na sequência, os resultados da validação e, finalmente, os resultados obtidos na análise proposta nesse estudo, avaliar os efeitos da razão volumétrica de compressão na eficiência e nas emissões.

5.1 Resultados da avaliação diagnóstica

Os resultados da avaliação diagnóstica, para obtenção dos parâmetros que caracterizam a combustão do ESH na rotação de 1800 rpm e carga de 35 kW, foram obtidos através do programa AVL *Burn* e estão divididos em três Tabelas: 26, 27 e 28. Cada tabela apresenta os valores dos parâmetros da seguinte forma:

1. Uma das três condições de temperatura interna das paredes do cilindro, propostas no fluxograma de simulações da Figura 32 no capítulo 4.4.1;
2. Resultados da análise numérica utilizando dois submodelos (*Hohenberg* e *Woschni*) para determinação do coeficiente de troca térmica por convecção;
3. Cada submodelo de troca térmica contém os resultados dos parâmetros para cada um dos cinco combustíveis propostos;
4. As variáveis avaliadas na análise numérica foram: o SOC (início da combustão) [ms], a Dur. (Duração da combustão) [ms], o parâmetro de forma da curva de liberação de calor (m) [-] e o balanço de energia (Bal.) [-];
5. Valores de MFB ajustado (*Mass Fraction Burned*), os quais são valores resultantes de um processo de ajuste à curva de pressão experimental e que também considera o balanço de energia. O balanço de energia é a razão entre a soma da energia liberada na combustão e na exaustão

pela energia contida na fração de combustível admitida, e por isso deve ser menor ou mais próximo de 1 (um);

6. Valores de MFB (*Vibe*) que são valores em que, após o cálculo dos parâmetros de combustão (SOC, Dur. e m), a curva *Vibe* é ajustada à curva da taxa de liberação de calor.

Tabela 26 - Resultados da simulação no AVL Burn 200°C, 35kW a 1800rpm

Temperatura das Paredes Internas da Câmara de Combustão												
200°C					MFB (Ajustado)				MFB (<i>Vibe</i>)			
Combustível	<i>Hohenberg</i>				[°CA DPMS]				[°CA DPMS]			
	SOC [°CA]	Dur. [°CA]	m [-]	Bal. [-]	5%	10%	50%	90%	5%	10%	50%	90%
EHC	-3,13	23,70	2,85	0,9696	2,57	4,49	9,96	14,50	3,45	4,84	9,90	14,70
EHC17	-4,11	24,50	2,76	1,0010	1,30	3,50	9,19	14,00	2,47	3,90	9,15	14,20
EHC27	-5,55	27,50	2,69	1,0010	0,43	2,96	9,22	15,00	1,71	3,28	9,22	14,90
EHC37	-7,47	28,60	2,37	0,9990	-2,05	0,43	7,01	13,50	-0,80	0,79	7,01	13,20
EHC47	-7,04	30,00	1,96	1,0000	-2,95	-0,20	6,73	14,50	-1,34	0,24	6,76	13,70

200°C					MFB (Ajustado)				MFB (<i>Vibe</i>)			
Combustível	<i>Woschni</i>				[°CA DPMS]				[°CA DPMS]			
	SOC [°CA]	Dur. [°CA]	m [-]	Bal. [-]	5%	10%	50%	90%	5%	10%	50%	90%
EHC	-2,73	23,70	2,76	0,9958	2,92	4,74	10,20	14,80	3,67	5,07	10,10	14,80
EHC17	-3,56	24,10	2,52	1,0120	1,61	3,51	9,03	14,10	2,39	3,78	9,01	14,10
EHC27	-4,22	26,50	2,34	0,9950	0,82	3,04	9,11	15,00	1,87	3,33	9,10	14,90
EHC37	-8,55	29,30	2,48	0,9914	-3,21	-0,20	6,59	13,20	-1,42	0,24	6,59	12,90
EHC47	-6,81	29,80	1,92	0,9976	-2,85	-0,14	6,735	14,60	-1,29	0,27	6,76	13,70

Fonte: Dados da pesquisa

Na Tabela 26 são mostrados os resultados da simulação pelo AVL Burn para

valores de temperatura interna das paredes do cilindro em 200° C.

E na Tabela 27 são mostrados os resultados da análise diagnóstica da curva de pressão experimental supondo que a temperatura interna das paredes do cilindro manteve-se em 300° C, rotação e carga constantes.

Tabela 27 - Resultados da simulação no AVL Burn 300°C, 35kW a 1800rpm

Temperatura das Paredes Internas da Câmara de Combustão												
300°C					MFB (Ajustado)				MFB (Vibe)			
Combustível	Hohenberg				[°CA DPMS]				[°CA DPMS]			
	SOC [°CA]	Dur. [°CA]	m [-]	Bal. [-]	5%	10%	50%	90%	5%	10%	50%	90%
EHC	-3,09	23,60	2,81	0,9703	2,59	4,44	9,87	14,40	3,38	4,76	9,28	14,60
EHC17	-3,97	24,00	2,70	0,9843	1,43	3,43	8,98	13,80	2,37	3,76	8,94	13,90
EHC27	-4,47	27,60	2,31	1,0300	0,56	3,02	9,30	15,70	1,78	3,30	9,31	15,40
EHC37	-7,24	28,50	2,31	1,0000	-1,97	0,45	7,00	13,60	-0,77	0,80	7,01	13,30
EHC47	-6,71	29,90	1,88	1,0000	-2,83	-0,16	6,71	14,60	-1,29	0,26	6,74	13,70

300°C												
300°C					MFB (Ajustado)				MFB (Vibe)			
Combustível	Woschni				[°CA DPMS]				[°CA DPMS]			
	SOC [°CA]	Dur. [°CA]	m [-]	Bal. [-]	5%	10%	50%	90%	5%	10%	50%	90%
EHC	-3,39	23,80	2,75	0,9752	2,13	4,09	9,57	14,30	3,06	4,40	9,53	14,40
EHC17	-4,50	24,50	2,69	0,9947	0,67	3,02	8,70	13,70	2,00	3,37	8,66	13,80
EHC27	-3,87	26,40	2,21	0,9972	0,91	3,02	9,03	15,10	1,84	3,28	9,03	14,90
EHC37	-6,78	28,30	2,22	1,0030	-1,77	0,59	7,07	13,70	-0,64	0,93	7,08	13,40
EHC47	-6,52	29,70	1,86	0,9994	-2,67	-0,03	6,78	14,70	-1,18	0,35	6,81	13,80

Fonte: Dados da pesquisa

Na Tabela 28 são mostrados os resultados da análise supondo que a temperatura interna das paredes do cilindro manteve-se em 400° C, e ainda com

rotação e carga constantes iguais a 1800rpm e 35kW, respectivamente.

Tabela 28 - Resultados da simulação no AVL Burn 400°C, 35kW a 1800rpm

Temperatura das Paredes Internas da Câmara de Combustão												
400°C					MFB (Ajustado)				MFB (Vibe)			
Combustível	Hohenberg				[°CA DPMS]				[°CA DPMS]			
	SOC [°CA]	Dur. [°CA]	<i>m</i> [-]	Bal. [-]	5%	10%	50%	90%	5%	10%	50%	90%
EHC	-2,87	24,00	2,73	1,0050	2,73	4,61	10,10	14,90	3,52	4,93	10,10	15,00
EHC17	-4,77	24,40	2,72	0,9761	0,40	2,74	8,43	13,30	1,72	3,14	8,39	13,50
EHC27	-4,33	26,30	2,36	0,9761	0,73	2,93	8,94	14,70	1,76	3,23	8,94	14,70
EHC37	-6,76	28,40	2,14	1,0010	-1,92	0,39	6,86	13,70	-0,83	0,69	6,86	13,30
EHC47	-6,70	29,40	1,89	0,9802	-2,75	-0,18	6,57	14,30	-1,33	0,21	6,59	13,50

400°C					MFB (Ajustado)				MFB (Vibe)			
Combustível	Woschni				[°CA DPMS]				[°CA DPMS]			
	SOC [°CA]	Dur. [°CA]	<i>m</i> [-]	Bal. [-]	5%	10%	50%	90%	5%	10%	50%	90%
EHC	-2,49	23,40	2,66	0,9870	3,03	4,69	10,00	14,70	3,59	4,96	9,98	14,80
EHC17	-3,42	23,70	2,51	0,9908	1,74	3,51	8,90	13,90	2,39	3,74	8,88	13,90
EHC27	-3,94	26,10	2,26	0,9793	0,95	3,02	8,95	14,80	1,83	3,26	8,95	14,70
EHC37	-6,77	28,20	2,22	0,9987	-1,75	0,58	7,03	13,60	-0,65	0,91	7,04	13,30
EHC47	-6,28	29,70	1,79	0,9993	-2,61	-0,02	6,75	14,70	-1,16	0,34	6,78	13,80

Fonte: Dados da pesquisa

Considerando os dados das três tabelas notou-se a ocorrência do aumento no avanço (SOC) e na duração da combustão com o aumento da hidratação tendo provável relação com a diminuição da velocidade laminar de chama com a presença da água.

O parâmetro “*m*”, referente à forma da curva de liberação de calor não

apresentou variação significativa, nem com o aumento da hidratação e tampouco com o da temperatura, mantendo-se entre 2 e 3.

Em todas as simulações, 50% da fração de massa queimada manteve-se entre 6°C e 10°C, sendo o limite superior encontrado (10° CA) o valor de MBT proposto no trabalho experimental de Brito Jr. (2013).

Os resultados do balanço de energia determinaram quais parâmetros da combustão foram selecionados para parametrizar o modelo numérico que propôs avaliar os efeitos da alteração da razão volumétrica de compressão. Valores de “Bal” que validam a análise diagnóstica são aqueles menores e mais próximos de um. Os valores iguais a um representam uma condição ideal e acima deste valor a análise é inválida. Os resultados de balanço de energia que atenderam ao pré-requisito de validação da análise foram aqueles em que a temperatura interna das paredes do cilindro foi prescrita a 400°C e o submodelo de *Woschni* para todos os combustíveis (vide tabela 28).

Desta forma, foram considerados os valores de: SOC, Dur., m , e submodelo de *Woschni*, da Tabela 28, parâmetros estes utilizados para descrever a combustão do ESH e inseridos na seção de configuração da curva *Vibe* duas zonas.

5.2 Validação do modelo numérico

Nesse item foram analisados os resultados para a validação do modelo numérico seguindo a ordem proposta no fluxograma de validação, Figura 33.

5.2.1 Simulação do modelo numérico no ciclo Diesel

Avaliou-se o modelo numérico do motor base em seu ciclo original, Diesel, antes da conversão para o ciclo Otto, utilizando dois submodelos de transferência de calor para determinar o coeficiente de transferência de calor por convecção: *Woschini* e *Hohenberg*. Os resultados são mostrados na Tabela 29 e o objetivo do procedimento foi refinar os parâmetros do modelo numérico antes da conversão para o ciclo Otto, facilitando o procedimento de validação.

Tabela 29 - Simulação do motor MWM229/4 no ciclo Diesel, 1800rpm

Modelo	IMEP (bar)	Potência (kW)	Diferença (Abs.)	Diferença (%)
Fabricante MWM	-	49,00	-	-
Simulado Ciclo Diesel <i>Woschni</i>	10,70	49,25	0,25	0,51
Simulado Ciclo Diesel <i>Hohenberg</i>	11,40	53,25	4,25	8,67

Fonte: Dados da pesquisa

Com base nos dados da Tabela 29, comparando o valor da potência máxima do motor, fornecido pelo fabricante MWM, e os resultados simulados, utilizando dois submodelos de *Hohenberg* e *Woschni*, observou-se uma menor diferença absoluta entre os dados para o submodelo de *Woschni* de 0,25 kW, o que equivale a 0,5%.

5.2.2 Conversão do modelo numérico e validação no ciclo Otto

O modelo numérico o qual foi simulada a operação do motor no ciclo Diesel foi convertido para realizar a validação e a simulação no ciclo Otto. O submodelo de transferência de calor adotado para o ciclo Diesel foi o de *Woschni* que obteve resultados com menor diferença entre os resultados simulados e os experimentais. O submodelo de *Hohenberg* foi utilizado para a simulação de operação do motor no ciclo Otto porque o modelo de *Woschni* superestimou os parâmetros de desempenho neste ciclo.

A temperatura assumida para as paredes internas do cilindro foi de 400 °C, de acordo com os resultados da simulação diagnóstica realizada pelo AVL *Burn*.

A utilização dos combustíveis propostos, misturas de etanol e água, foi simulada e os resultados comparados, individualmente, com os dados experimentais correspondentes. Os resultados dos parâmetros de desempenho são mostrados na Tabela 30 e os resultados de emissões, na Tabela 33. Valores da diferença percentual entre os dados experimentais e simulados foram os parâmetros utilizados para avaliação qualitativa do modelo numérico e validação.

Durante as simulações no ciclo Otto a rotação (1800 rpm), a potência (35 kW), a razão volumétrica de compressão (17:1) e o número de octanas requerido pelo motor (96) foram mantidos constantes, possibilitando a comparação entre os

parâmetros de desempenho (\dot{m}_a , \dot{m}_f , SFC e eficiência global) e de emissões (CO, HC e NO_x).

Na Tabela 31 são apresentados os resultados dos parâmetros de desempenho simulados, os resultados da avaliação experimental realizada por Moreira (2018), a incerteza de medição e a diferença percentual entre os dados simulados e os experimentais. Também são mostrados os valores de potência, do torque calculado pelo *software* AVL Boost e do número de octanas requerido para a operação do motor livre de detonação.

Tabela 30 - Resultados dos parâmetros de desempenho experimentais e da simulação do modelo numérico no ciclo Otto, 17:1, 35kW e 1800rpm

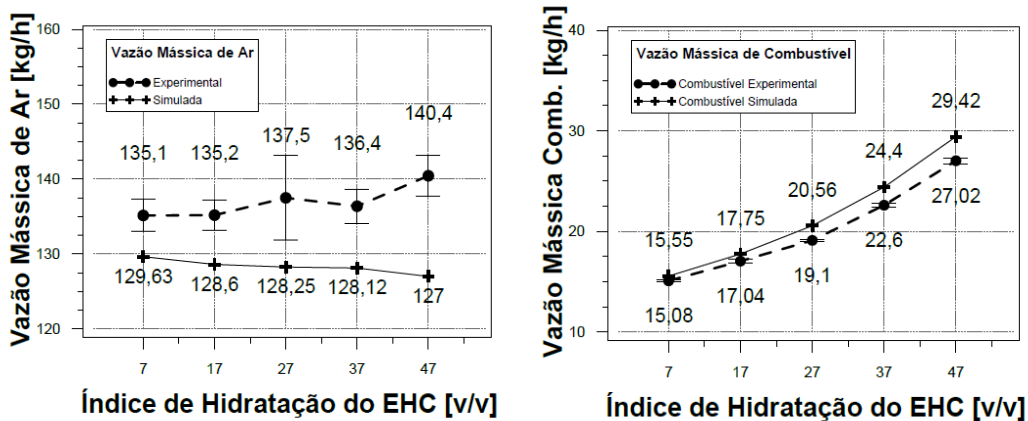
PARÂMETROS										
Combustível	\dot{m}_a (kg/h)				\dot{m}_f (kg/h)				Potência [kW]	
	Sim	Exp.	Inc.	Dif. [%]	Sim	Exp.	Inc.	Dif. [%]		
B8	-	196,2	4,70	-	-	8,86	0,13	-	35,0	
EHC	129,63	135,14	2,12	4,07	15,55	15,08	0,09	3,11	35,0	
EHC17	128,60	135,18	2,02	4,86	17,75	17,04	0,19	4,16	35,0	
EHC27	128,25	137,49	5,64	6,72	20,56	19,10	0,12	7,64	35,0	
EHC37	128,12	136,37	2,30	6,04	24,40	22,60	0,21	7,96	35,0	
EHC47	127,00	140,44	2,73	9,56	29,42	27,02	0,28	8,88	35,0	

Combustível	SFC (kg/(kW.h))				Eficiência Global [%]				T [N.m]	ON [-]
	Sim	Exp.	Inc.	Dif. [%]	Sim	Exp.	Inc.	Dif. [%]		
B8	-	0,2621	0,0001	-	-	32,5	1,7	-	-	-
EHC	0,4506	0,4510	0,0001	0,08	32,81	32,47	0,53	1,04	186,0	95,60
EHC17	0,5125	0,5100	0,0002	0,49	32,96	32,74	0,79	0,67	185,0	95,65
EHC27	0,5925	0,5720	0,0001	3,58	32,99	33,78	0,51	2,33	184,6	96,90
EHC37	0,7061	0,6767	0,0002	4,34	33,20	33,43	0,57	0,68	185,8	96,00
EHC47	0,8570	0,8096	0,0003	5,85	33,25	34,14	0,58	2,60	184,0	95,50

Fonte: Dados da pesquisa

A Figura 36 apresenta os gráficos comparativos entre a vazão mássica de ar e de combustível, simulado e experimental.

Figura 36 - Vazão mássica de ar e de combustível 35 kW, 1800 rpm em função do índice de hidratação



Fonte: Dados da pesquisa

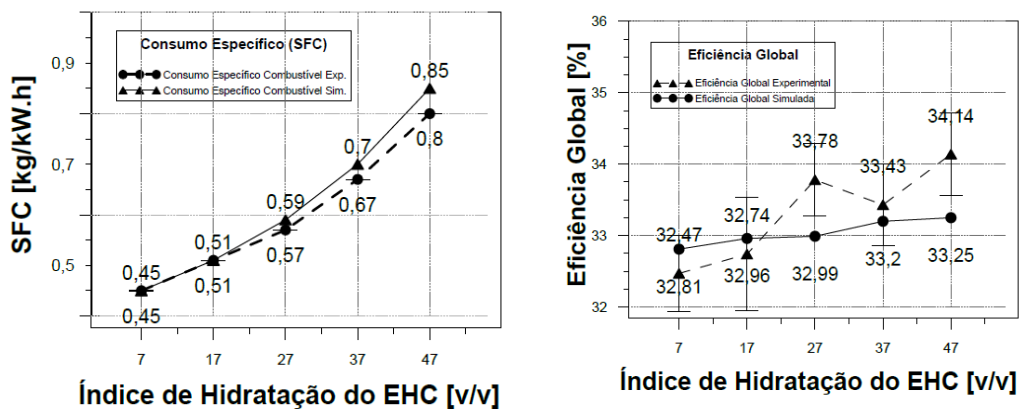
Em conclusão de sua análise experimental, Moreira (2018) observou o aumento no consumo de combustível com o aumento do índice de hidratação em função da redução do poder calorífico inferior, fato também relatado na literatura estudada. O comportamento semelhante foi observado na análise numérica e a diferença entre os dados simulados e experimentais variou de 3% para o EHC e 8,88% para o EHC47 para a vazão mássica de combustível, Figura 36, e diferença na vazão mássica de ar de 4% a 9,56%

Na Figura 37 são apresentados os resultados simulados do consumo específico de combustível e da eficiência global, comparados com os resultados obtidos experimentalmente. Nos resultados da simulação, tanto o SFC quanto a eficiência global aumentaram com comportamento linear em relação ao índice de hidratação e a diferença entre os dados experimentais e simulados foram menores que 6%. Moreira (2018) observou menor SFC quando utilizado o EHC na carga de 35 kW e maior consumo para o EHC47.

Moreira (2018) observou que a eficiência global do motor, operando no ciclo Otto, foi menor que no ciclo Diesel até a carga de 32,5 kW e para a carga de 35 kW a eficiência foi a mesma para ambos os ciclos. Não ocorreram alterações significativas da eficiência com o aumento do índice de hidratação, como mostrado no gráfico da Figura 37, que foi compensado pelo aumento do consumo de combustível. Morais (2016) observou aumento na eficiência com o aumento da hidratação do etanol. Ambrós et al. (2015) verificaram que a hidratação não afeta a realização de trabalho até um determinado percentual. Sari (2017) observou uma redução da eficiência

global com a hidratação para razões volumétricas de compressão abaixo de 14,5:1.

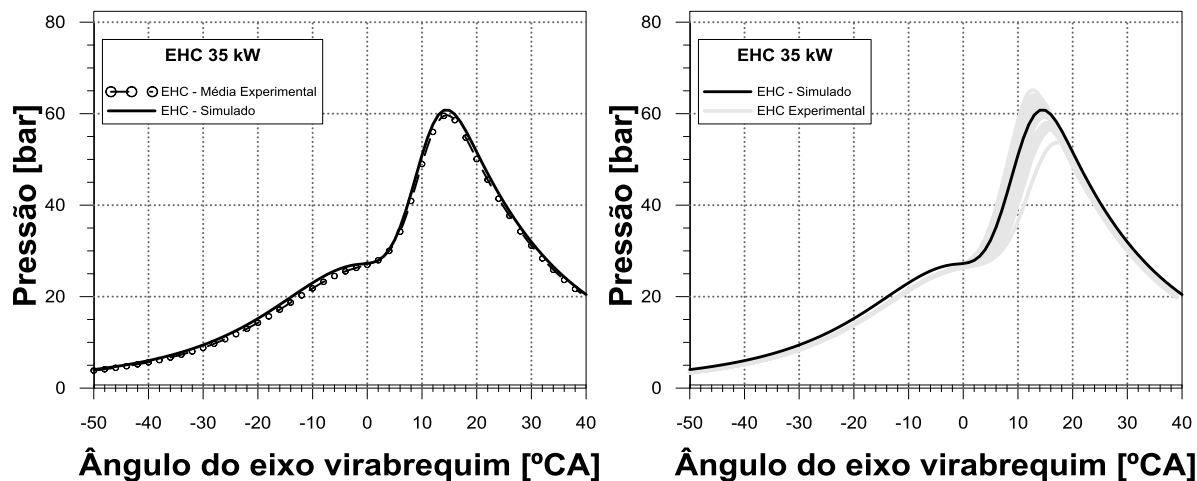
Figura 37 - SFC e Eficiência global para carga de 35 kW, 1800 rpm em função do índice de hidratação

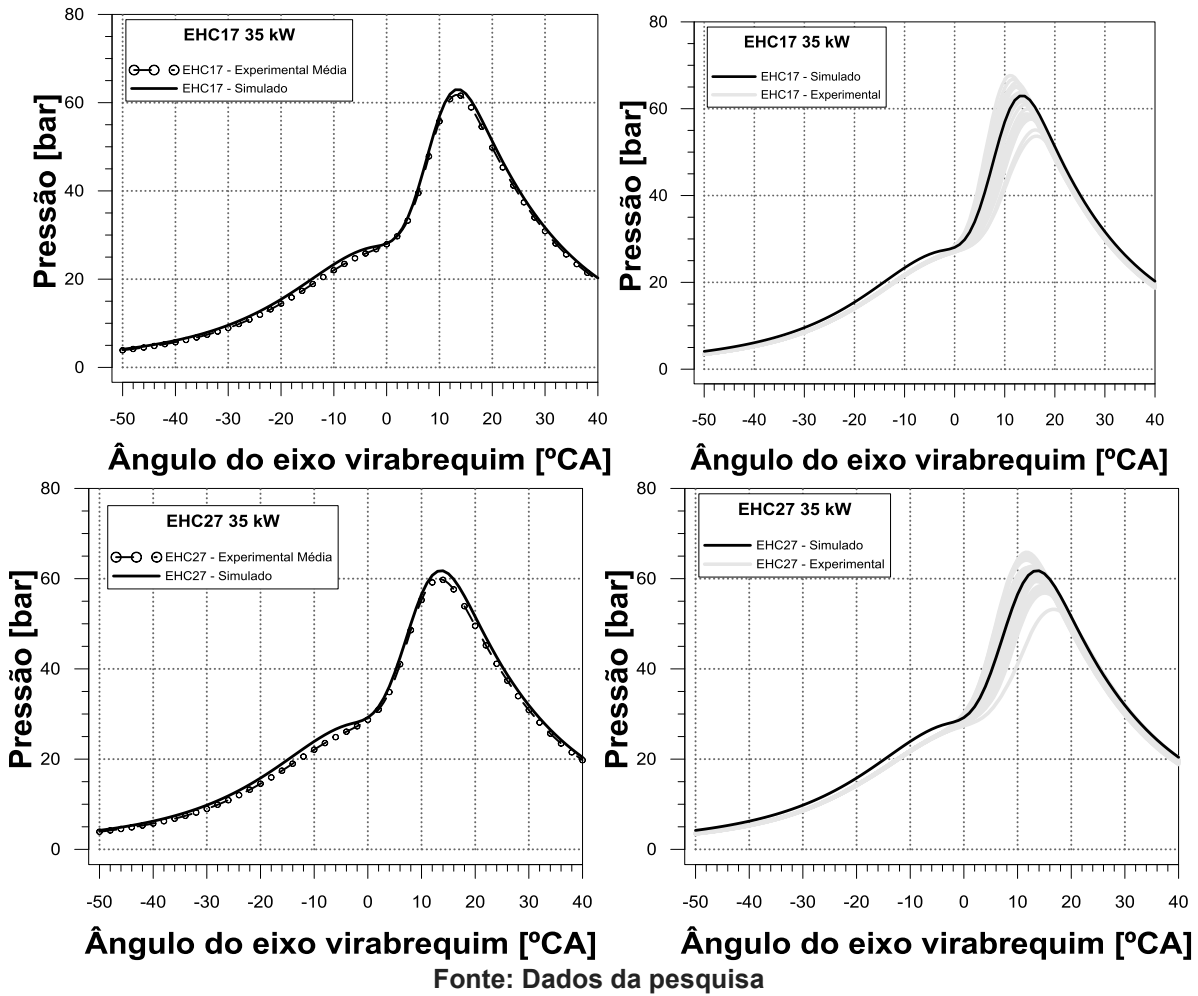


Fonte: Dados da pesquisa

Na Figura 38 são mostrados dois gráficos das curvas de pressão para cada combustível EHC, EHC17 e EHC27. Na Figura 39, as curvas para o EHC37 e EHC47.

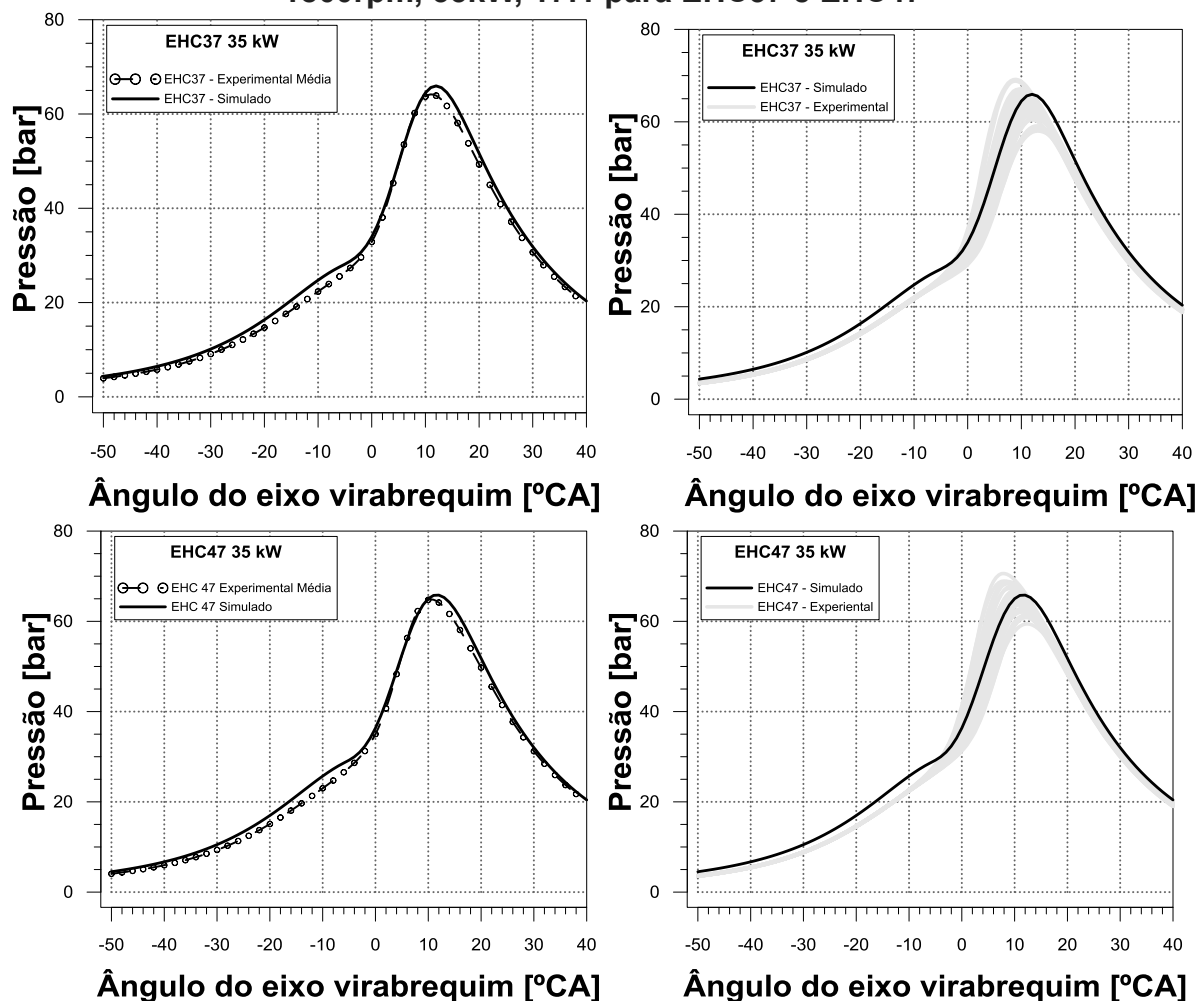
Figura 38 - Comparação entre as curvas pressão experimental e simulada a 1800rpm, 35kW, 17:1 para EHC, EHC17 e EHC27





As comparações entre essas curvas qualificam os parâmetros da curva *Vibe* duas zonas, utilizados para reproduzir a combustão e os parâmetros de desempenho que caracterizam o modelo numérico. Na primeira curva do par de curvas, para cada combustível, são comparadas a pressão média experimental e a simulada, onde foi possível observar que a fase, o início e duração da combustão simulados coincidem com a curva experimental. Já na segunda curva, comparou-se a pressão simulada com 30 curvas experimentais, considerando o coeficiente de variância.

Figura 39 - Comparação entre as curvas pressão experimental e simulada, 1800rpm, 35kW, 17:1 para EHC37 e EHC47



Fonte: Dados da pesquisa

A diferença entre os picos de pressão simulados e experimentais, observados na Tabela 31, mantiveram-se entre 0,95 bar (1,46%) e 1,86 bar (3,10%), e a diferença entre os ângulos variando entre de 0,5 °CA e 1,5 °CA, maiores diferenças foram encontradas para maiores teores de hidratação.

Tabela 31 - Diferença entre picos de pressão experimental e simulados do modelo numérico no ciclo Otto, 17:1, 35kW e 1800rpm

PICO DE PRESSÕES / ÂNGULO						
Combustível	Pressão Máxima [bar]			Ângulo de Pressão Máxima [°CA]		
	Sim	Exp.	Dif.	Sim	Exp.	Dif.
EHC	60,75	59,67	1,08	14	14,5	0,5
EHC17	62,92	61,78	1,14	14	13,5	0,5
EHC27	61,74	59,88	1,86	14	13,5	0,5
EHC37	65,95	64,15	1,80	12	11,0	1,0
EHC47	65,81	64,86	0,95	12	10,5	1,5

Fonte: Dados da pesquisa

Na avaliação dos dados de desempenho e das curvas de pressão concluiu-se que a parametrização permitiu a reprodução do comportamento das variáveis de interesse do trabalho, pelo modelo numérico, quando comparados com os dados do trabalho de Moreira (2018).

Os resultados simulados referentes a emissões são apresentados na Tabela 33 e também comparados com os dados experimentais.

Tabela 32 - Resultados de emissões experimentais e da simulação do modelo numérico no ciclo Otto, 17:1, 35kW e 1800rpm

PARÂMETROS												
Combustível	CO (g/(kW.h))				HC (g/(kW.h))				NO _x (g/(kW.h))			
	Sim	Exp.	Inc.	Dif. [%]	Sim	Exp.	Inc.	Dif. [%]	Sim	Exp.	Inc.	Dif. [%]
B8	-	16,6	0,2	-	-	0,44	0,01	-	-	5,49	0,12	-
EHC	46,25	46,6	8,3	0,75	0,58	0,55	0,01	5,45	9,70	9,69	0,03	0,10
EHC17	37,37	37,0	5,2	1,00	0,67	0,89	0,03	24,71	7,55	9,83	0,03	23,19
EHC27	31,44	32,3	4,1	2,66	0,73	1,10	0,04	33,63	4,57	9,89	0,05	53,79
EHC37	25,00	35,9	5,0	30,36	0,88	1,83	0,13	51,91	2,90	7,29	0,02	60,21
EHC47	18,01	21,10	1,7	14,64	0,99	3,06	0,36	67,64	1,18	7,99	0,02	85,23

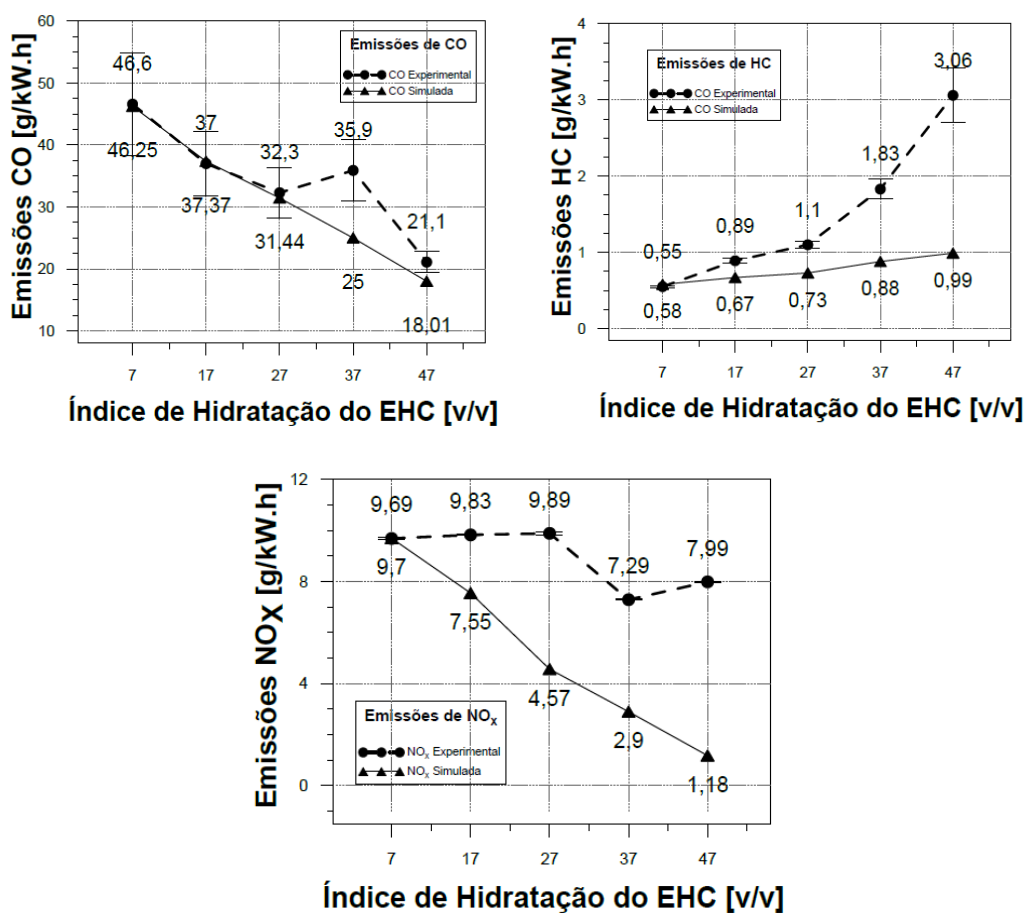
Fonte: Dados da pesquisa

Os resultados simulados para emissões de CO, quando comparados com

dados experimentais, mantiveram-se dentro da incerteza de medição e com discrepância para o EHC37, fenômeno não detalhado por Moreira (2018) em seu estudo experimental. Para os demais combustíveis avaliados a diferença percentual manteve-se dentro dos 20% estipulados para a validação.

A parametrização do modelo de emissões de CO permitiu reproduzir o comportamento dessas emissões. Na Figura 40 observou-se a redução nas emissões de CO com o aumento do índice de hidratação divergindo de uma parte dos trabalhos como: Saxena et al. (2014); Martins, Lanzasova e Sari (2015); Martins, Lanzasova e Sari (2015); Lanzasova, Nora e Zhao (2016); Roso et al. (2016) e Noh e Soo-Young (2017), que observaram aumento nas emissões de CO devido à possível redução na reatividade de formação de CO com o aumento da hidratação.

Figura 40 - Emissões experimentais e simuladas do modelo no ciclo Otto, em função do índice de hidratação 1800rpm, 35kW



Fonte: Dados da pesquisa

Nos resultados de emissões experimentais de HC observou-se um aumento com o aumento do índice de hidratação do etanol, também observado na literatura pesquisada. Com a parametrização do modelo numérico de emissões de HC, foi possível observar, no gráfico da Figura 40, o mesmo fenômeno, porém, o aumento nas emissões, prevista no modelo, tem comportamento linear com a hidratação e somente a emissão para o EHC está dentro do parâmetro de validação de 20%.

Os resultados simulados para as emissões de NO_x apresentaram reduções com o aumento do índice de hidratação, fenômeno também observado na literatura. A redução da temperatura interna da câmara de combustão, em consequência da elevação da hidratação, é a possível causa para diminuição de emissões de NO_x. Nos dados experimentais não foi observado o comportamento de redução linear com a hidratação gerando diferenças percentuais elevadas quando comparado aos dados simulados.

Considerou-se o modelo de emissões de CO para avaliação proposta no trabalho por obedecer ao critério de validação. A parametrização dos modelos de emissões de HC e NO_x permitiu a previsão de emissão somente para o EHC extrapolando os valores para os demais combustíveis. Assim, esses modelos foram usados somente para observar a tendência nessas emissões.

5.3 Análise numérica do modelo operando no ciclo Otto alterando a razão Volumétrica de compressão

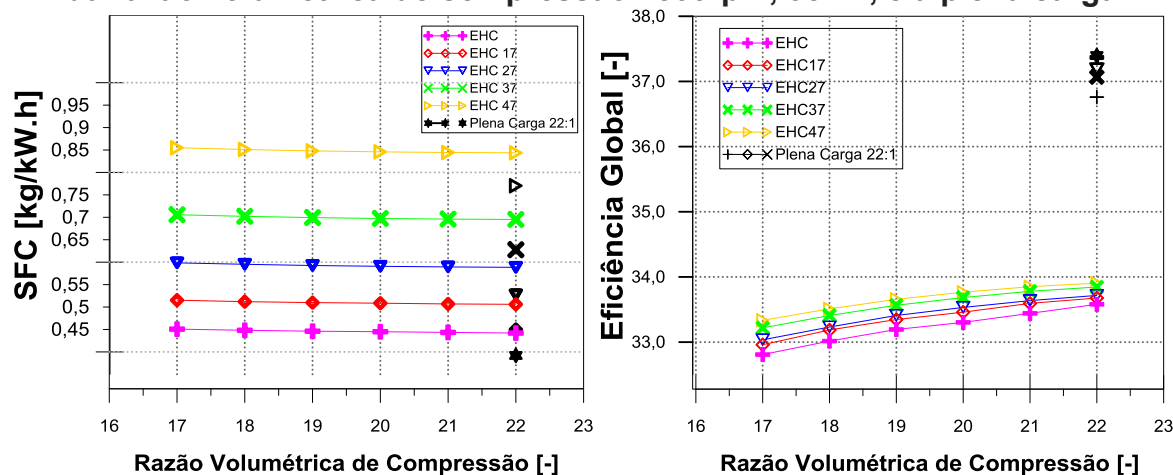
Após a validação do modelo numérico, as simulações seguiram a proposta do trabalho, 35 kW, 1800 rpm, submodelo de *Hohenberg* e alterando-se a razão volumétrica de compressão de 17:1 até 22:1, em intervalos de 1.

5.3.1 Evolução dos parâmetros de desempenho com a razão volumétrica de compressão

A Figura 41 apresenta os resultados simulados de consumo específico de combustível e de eficiência global, para cada combustível, alterando a razão volumétrica de compressão. Também foi avaliado os mesmos parâmetros para a hipótese de operação do motor em plena carga e na razão volumétrica de compressão

de 22:1, pontos destacados em preto.

Figura 41 - Consumo específico de combustível e eficiência global em função da razão volumétrica de compressão 1800rpm, 35kW, e a plena carga



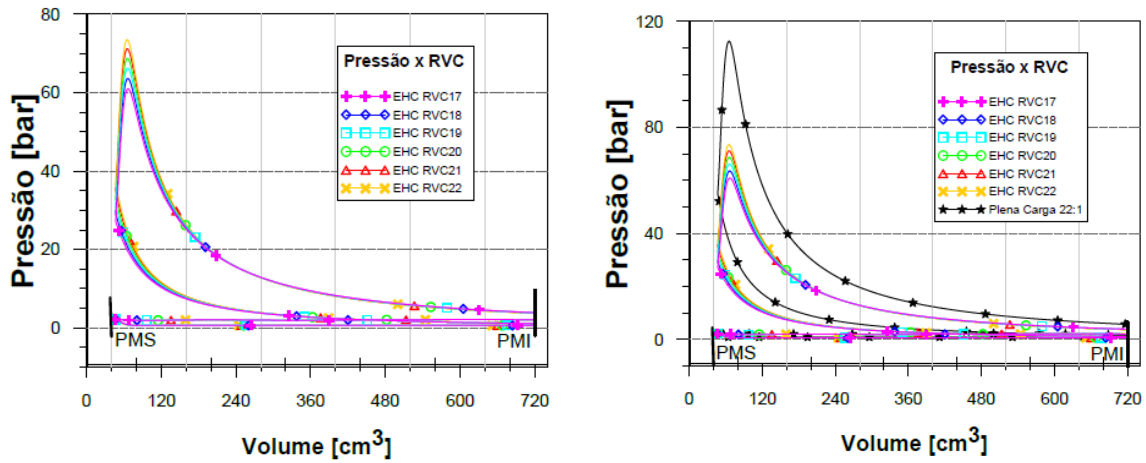
Fonte: Dados da pesquisa

O consumo específico de combustível não mostrou alteração significativa com a alteração da razão volumétrica de compressão, em comparação com os resultados experimentais a 17:1. Este fato pode estar relacionado com a manutenção da potência efetiva constante através da vazão mássica de ar e combustível. Já na avaliação do motor em plena carga e razão volumétrica de compressão (RVC) de 22:1, foi observado uma redução média no consumo específico de combustível de 12,7% para todos os combustíveis avaliados.

A eficiência global, para os combustíveis avaliados, apresentou aumento médio de 2% com o aumento da razão volumétrica de compressão. A plena carga, o EHC, seguido pelos EHC17 e EHC27 apresentaram aumento médio na eficiência de 11,3%. Esse aumento significativo pode estar relacionado com a redução na perda de carga no bombeamento e pelo aumento da potência efetiva de 35 kW para 62,5 kW, torque máximo de 180 N.m para 332,5 N.m, no ciclo Otto, e comparado aos 49 kW no ciclo Diesel.

O aumento da pressão com aumento da razão volumétrica de compressão resultou no aumento do trabalho realizado pelo cilindro, apresentado na Figura 42. No primeiro gráfico observa-se que o aumento na pressão é proporcional ao aumento da RVC. No segundo gráfico destacou-se maior aumento na pressão interna do cilindro a plena carga, com pico de pressão de 112,53 bar.

Figura 42 - Trabalho realizado pelo cilindro em função da razão volumétrica de compressão, 1800rpm, 35 kW e a plena carga

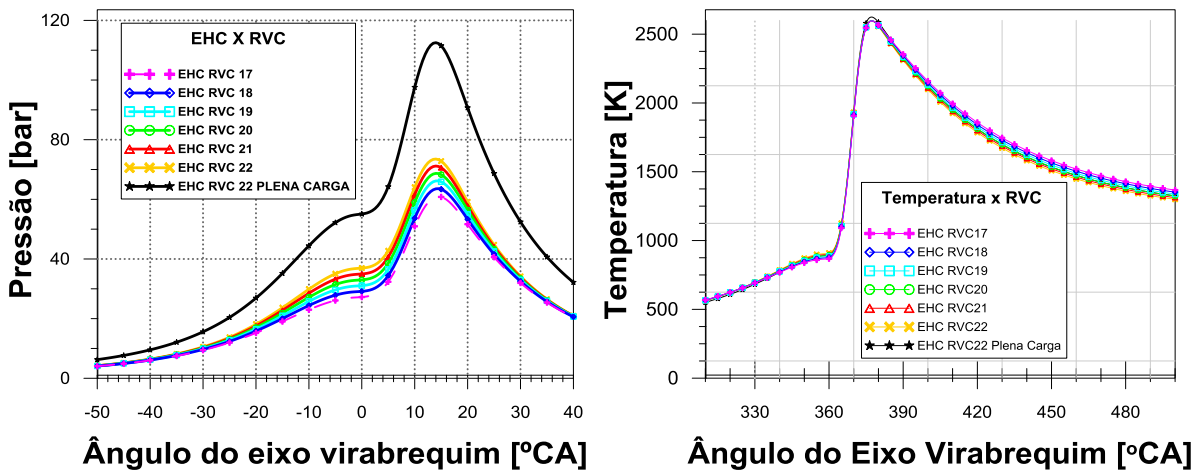


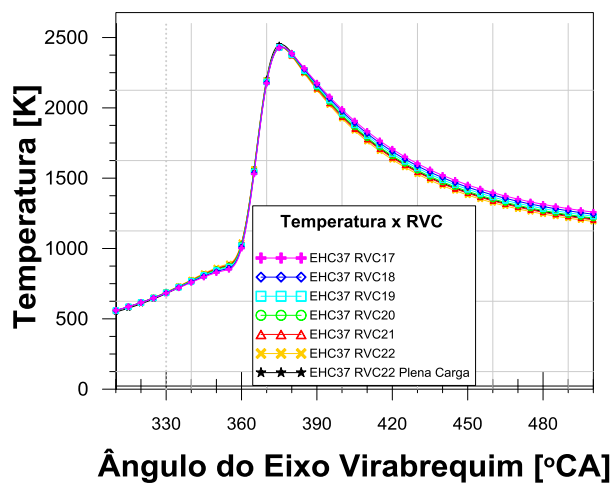
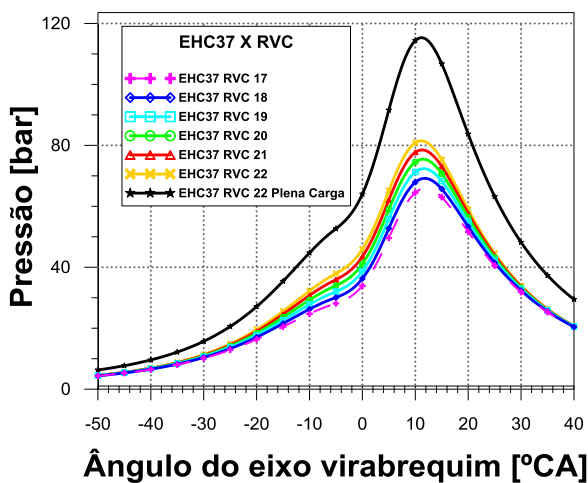
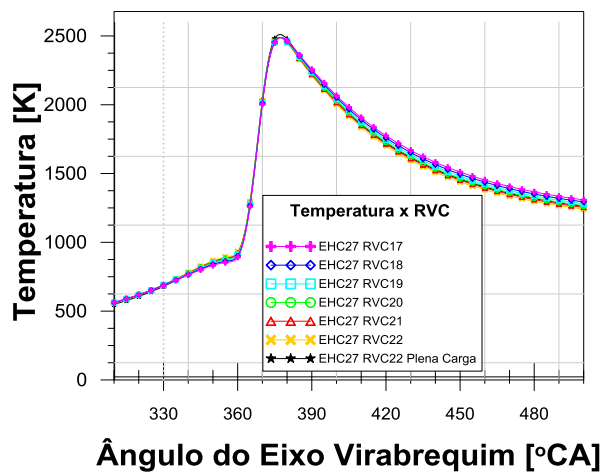
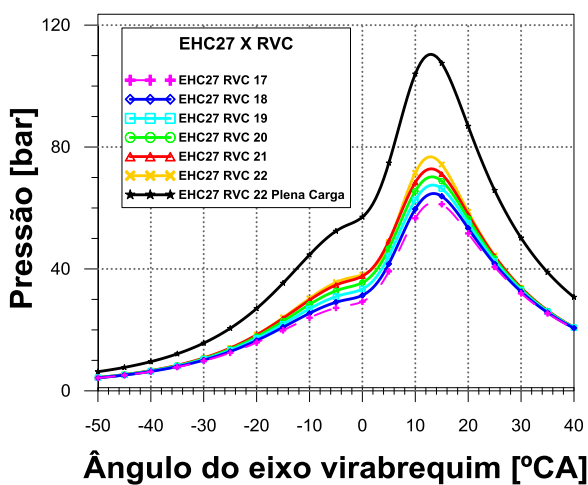
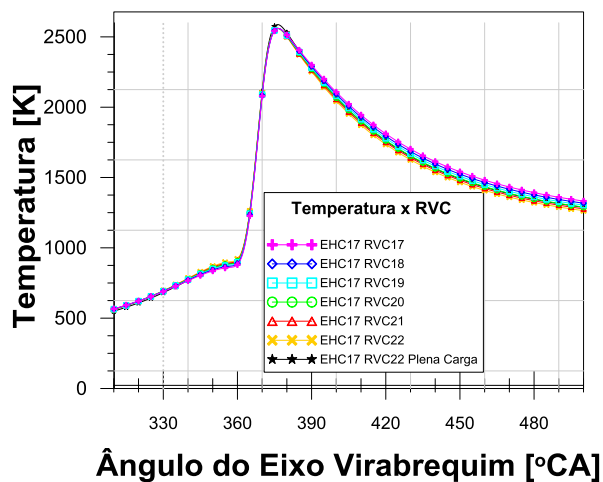
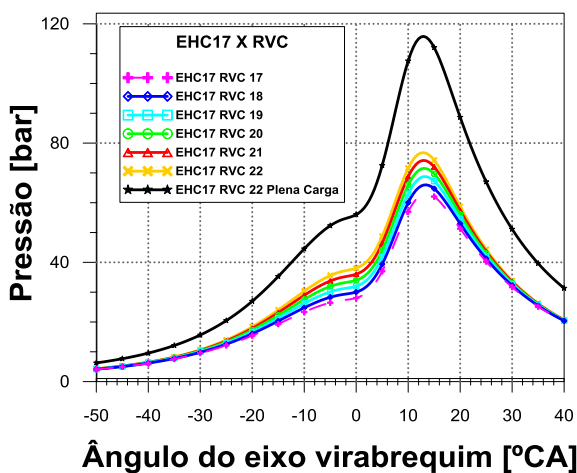
Fonte: Dados da pesquisa

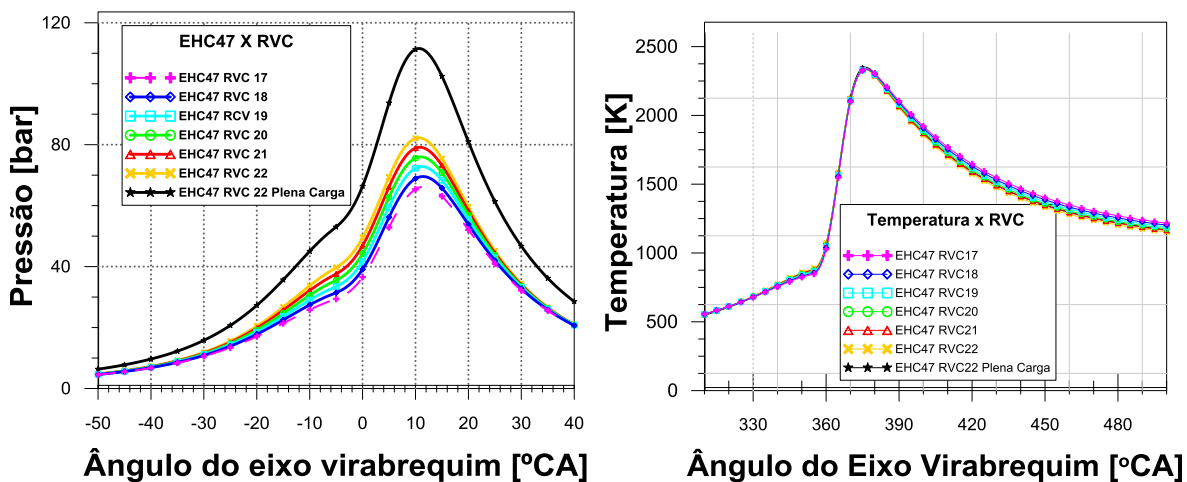
5.3.2 Variação da pressão e da temperatura com a razão volumétrica de compressão

A variação da pressão e da temperatura, para todos os combustíveis, foi avaliada em função da razão volumétrica de compressão. Dois gráficos foram desenvolvidos, um para pressão e um para temperatura, para cada combustível, são mostrados na Figura 43, onde observou-se o aumento da pressão com o aumento da RVC, porém a temperatura interna do cilindro não apresentou variação significativa com a RVC.

Figura 43 - Variação da pressão interna do cilindro e da temperatura com a razão volumétrica de compressão, 1800rpm, 35 kW e a plena carga







Fonte: Dados da pesquisa

O aumento da pressão observado nas curvas de pressão foi consequência do aumento da hidratação do etanol também com o aumento da razão volumétrica de compressão e da carga. São os fatores que contribuíram para atingir maiores pressões com a utilização do EHC17 (115,78 bar a 13 °CA), EHC37 (115,33 bar a 11 °CA) e EHC47 (111,55 bar a 10,5°CA) na razão volumétrica de compressão de 22:1.

O comportamento da temperatura apresentou alterações apenas com a hidratação do etanol não havendo interferência da RVC e nem com a carga, como observado nos gráficos da Figura 43.

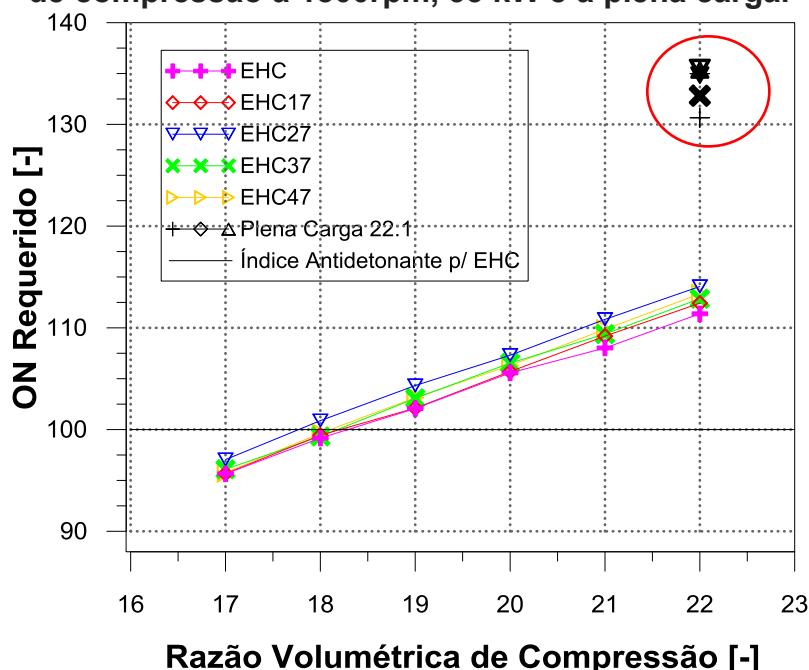
5.3.3 Variação do número de octanas requerido com a razão volumétrica de compressão

O AVL *Boost* calcula e apresenta em seus resultados o número de octanas requerido (ON) mínimo que o combustível utilizado precisa ter, em função da parametrização realizada. O gráfico da Figura 44 apresenta a variação do ON requerido em função da razão volumétrica de compressão, para os combustíveis propostos, na carga de 35 kW e também a plena carga. Foi considerado para o EHC comercial o IAD (índice antidetonante) de 100, que é a média dos valores de MON e RON do etanol hidratado combustível. Acima deste valor de IAD, somente para o EHC, pode ocorrer o fenômeno de detonação. Para o etanol com índices de hidratação maiores que 7% (v/v) foi considerado IAD > 110, valor obtido na literatura pesquisada.

Pelos resultados obtidos por simulação, apresentados na Figura 44, considerou-se ser possível operar com o EHC até a razão volumétrica de compressão

de 18:1 na carga de 35 kW e 1800 rpm. Para as demais misturas de etanol/água, igual e acima do EHC17, todas as operações são possíveis nas razões volumétricas de compressão propostas e também a plena carga. Essas operações podem ser realizadas, possivelmente sem a ocorrência de detonação, em função da presença de um maior volume de água na mistura do combustível, elevando assim seu número de octanas e atendendo o valor requerido.

Figura 44 - Variação do número de octanas requerido com a razão volumétrica de compressão a 1800rpm, 35 kW e a plena carga.



Fonte: Dados da pesquisa

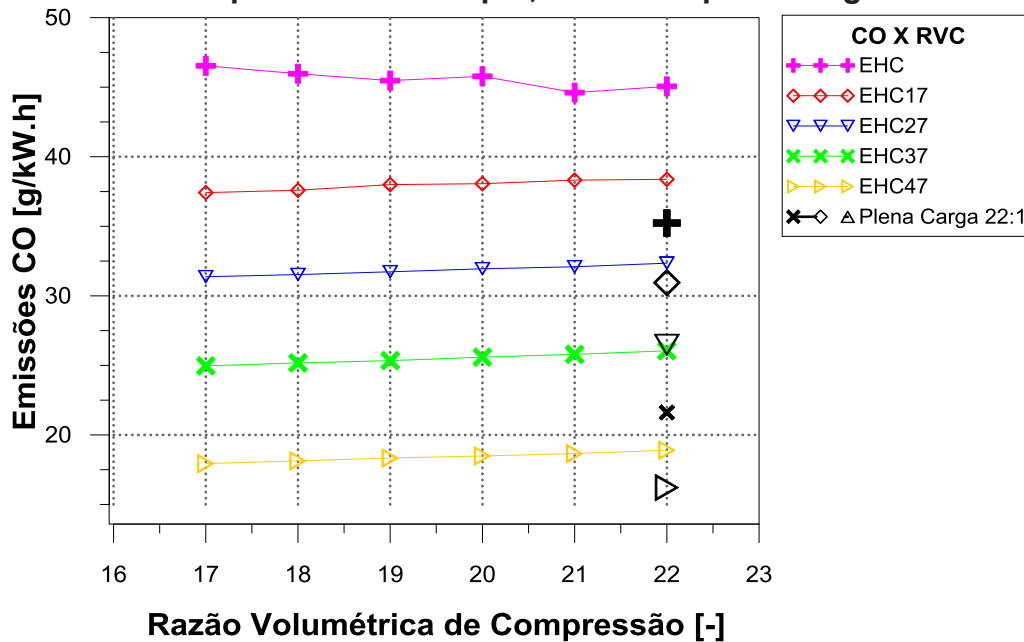
O número de octanas requerido determinado pelo AVL é função da temperatura da região dos gases não queimados, da pressão interna do cilindro, do início da combustão e o tempo para 85% de MFB. Não ocorrendo variação da temperatura com a RVC dependerá então o ON requerido somente da pressão interna do cilindro, da fase da combustão e da carga.

5.3.4 Emissões de CO com a variação da razão volumétrica de compressão

Na Figura 45 são apresentadas as emissões de CO para os combustíveis avaliados em função da razão volumétrica de compressão, hidratação e carga. Observou-se que a RVC não influenciou nas emissões de CO com diferenças

próximas a 2% em relação os dados de validação na RVC de 17:1. A plena carga e na RVC de 22:1 ocorreu redução significativa nessas emissões, para todos os combustíveis, com maior redução para o EHC de 32,0% seguido pelo EHC17 com 24,0% a plena carga, quando comparados com a RVC de 17:1 e carga de 35 kW.

Figura 45 - Variação das emissões de CO com a razão volumétrica de compressão a 1800 rpm, 35 kW e a plena carga



Fonte: Dados da pesquisa

5.3.5 Emissões de HC com variação da razão volumétrica de compressão

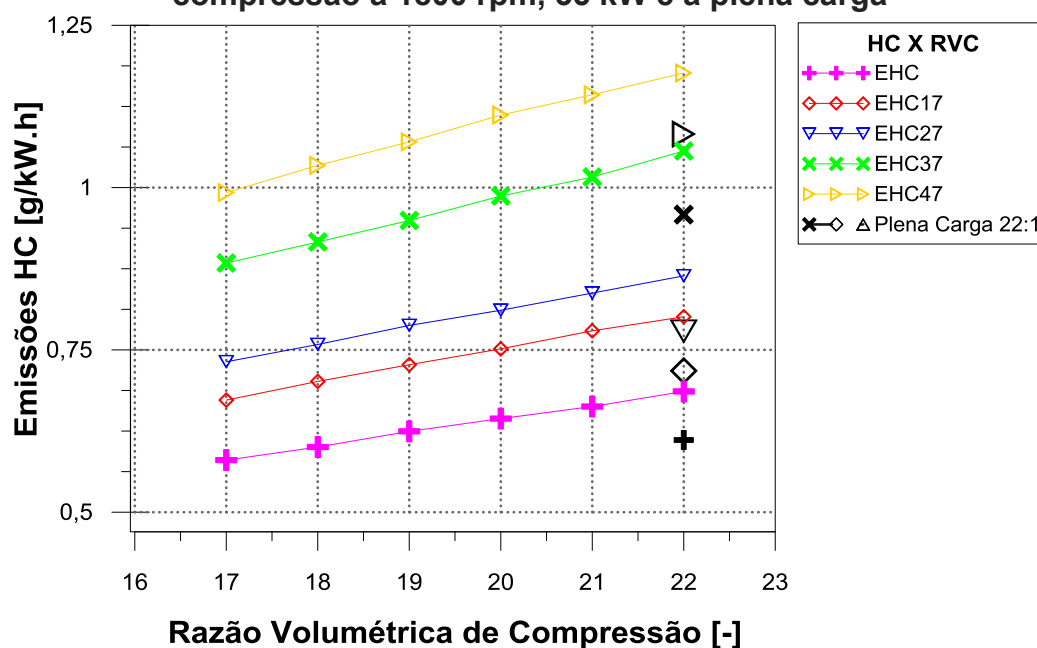
As emissões de HC, conforme a Figura 46, tenderam a aumentar com a hidratação e com o aumento da razão volumétrica de compressão. O modelo de emissões de HC não atendeu ao critério de validação com diferenças entre os dados simulados e experimentais superiores a 20%. Desta forma, o modelo foi utilizado para descrever somente a tendência do comportamento nessas emissões.

Os resultados simulados e dados experimentais descreveram maiores emissões para os combustíveis com maiores teores de hidratação e maiores razões volumétricas de compressão, como exemplo o EHC47, seguido pelo EHC37, comportamento similar observado pelos autores: Saxena et al. (2014); Lanzasova, Nora e Zhao (2016); Roso et al. (2016); Noh e Soo-Young (2017) e Sari (2017).

Supondo a operação em plena carga, houve tendência na diminuição das

emissões de HC com o aumento da razão volumétrica de compressão, para todos os combustíveis e emissões na RVC de 22:1, em plena carga, no mesmo patamar das emissões encontradas para a RVC de 19:1 a 35kW.

Figura 46 - Variação das emissões de HC com a razão volumétrica de compressão a 1800 rpm, 35 kW e a plena carga



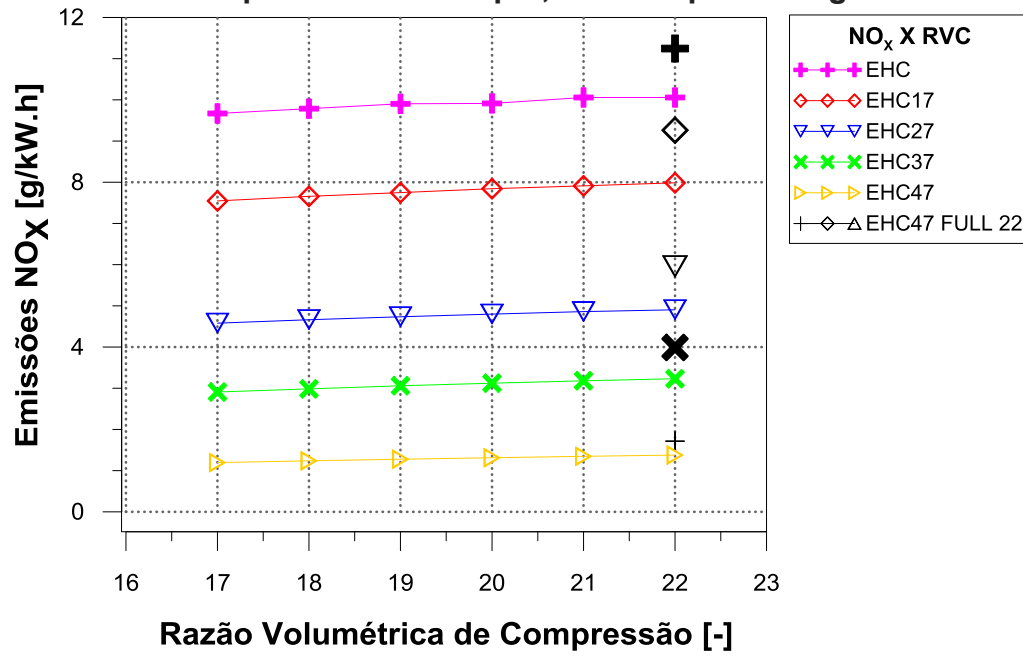
Fonte: Dados da pesquisa

5.3.6 Emissões de NO_x com variação da razão volumétrica de compressão

Na Figura 47 é apresentado o comportamento das emissões de NO_x, onde ocorreu tendência de maiores emissões para os combustíveis com menores teores de hidratação e a provável causa está relacionada com a combustão dessas misturas atingirem maiores temperaturas e os combustíveis com maiores teores de hidratação menores temperaturas na combustão ocorrendo menores emissões de NO_x.

A plena carga e na razão volumétrica de compressão de 22:1 ocorreu tendência de aumento nas emissões. As maiores emissões tenderam a ocorrer com a utilização de EHC e EHC17, em todas as RVC estudadas bem como a plena carga. A causa provável são as maiores temperaturas durante a combustão.

Figura 47 - Variação das emissões de NO_x com a razão volumétrica de compressão a 1800 rpm, 35 kW e plena carga



Fonte: Dados da pesquisa

6 CONCLUSÕES

O objetivo geral do trabalho, simular o comportamento de um motor a combustão interna do ciclo Diesel convertido para operar no ciclo Otto, alimentado com etanol sobre-hidratado e utilizando o AVL *Boost* foi realizado. O *software* apresentou capacidade de realizar este tipo de simulação com diferenças entre os resultados simulados de desempenho e experimentais inferiores a 10%.

Os parâmetros obtidos através da simulação diagnóstica, utilizando-se o traço de pressão experimental realizado por Moreira (2018) de todos os combustíveis estudados, contribuíram para validação do modelo numérico proposto através caracterização adequada da curva *Vibe* duas zonas, onde obteve-se proximidade entre as curvas de pressão experimental e simuladas, validando o modelo numérico.

Foi possível reproduzir os resultados dos dados experimentais do estudo realizado por Moreira (2018) utilizando o AVL *Boost* na conversão entre ciclos de um motor originalmente do Diesel, operando com índices de hidratação de 7% a 47%, e atendendo o critério de validação.

O modelo de *Woschni* apresentou resultados simulados mais próximos do experimentais para simulações no ciclo Diesel e *Hohenberg* o mais apropriado para simulação no ciclo Otto, pelo mesmo motivo.

O ganho de eficiência obtido com o aumento da razão volumétrica de compressão foi em média de 3% para todos os combustíveis avaliados na carga de 35 kW, 1800 rpm. Porém, a melhor condição de operação, considerando a eficiência e emissões, é observada a plena carga com a utilização do EHC17 e EHC27, sem ocorrência de detonação, obtendo aumento de eficiência médio de 11,30% e redução nas emissões de CO em 24% em relação à carga de 35 kW na razão volumétrica de compressão de 17:1

As emissões de NO_x não apresentaram variações relevantes nem com a variação da razão volumétrica de compressão e nem em carga máxima. As emissões de CO apresentaram aumento máximo de 4% com o aumento da razão volumétrica de compressão e redução com carga máxima a 22:1, de 24%.

As emissões de HC tenderam a aumentar com o aumento da razão volumétrica de compressão e com o índice de hidratação, apresentando valores médios de 18% para RVC de 22:1 em relação a 17:1.

A operação do motor utilizando etanol sobre-hidratado na conversão entre ciclos e substituindo o óleo diesel é viável quando em plena carga e na razão volumétrica de compressão de 22:1. Nessa configuração obteve-se potência efetiva de 62,5 kW, torque máximo de 332,5 N.m para o EHC 17, isto é, torque 84% maior que os 180 N.m para 35 kW.

Ao final da análise numérica, do motor utilizado como base, observou-se a possibilidade de operação com o etanol sobre-hidratado com índices de hidratação de até 47% (v/v). Para índices de hidratações acima de 7% (v/v) é também possível a operação do motor no ciclo Otto em razões volumétricas de compressão de 22:1 sem a ocorrência do fenômeno de detonação.

6.1 Sugestões para futuros trabalhos

Realizar simulação numérica do modelo, com a razão volumétrica de compressão original e turbo alimentado.

Realizar simulação numérica do modelo utilizando EGR para controle de carga, em substituição à válvula borboleta.

Realizar simulação do modelo no ciclo Atkinson, para maximização de eficiência global e estudo para aplicação híbrida.

Realizar simulação do modelo no ciclo Atkinson, turbo alimentado, utilizando EGR e alimentado com etanol sobre-hidratado para a aplicação híbrida.

REFERÊNCIAS

ALMEIDA, Leandro Quetz de. **Efeitos da adição de hidrogênio produzido por eletrólise em um veículo sobre o consumo de etanol e emissões de poluentes**. 2017. 215 F. Tese (Doutorado) - Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

ALMEIDA, Vinícius Tadeu dos Passos. **Simulação computacional de emissões e desempenho de um motor diesel operando com óleo diesel e hidrogênio**. 2012. 128 F. Dissertação (Mestrado) - Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

AMBRÓS, W.M. **Análise experimental e modelagem de motor de combustão interna operando com etanol super-hidratado**. Mestrado (Dissertação). Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos, Controle Ambiental e Otimização Energética, Universidade Federal de Santa Maria, 2013.

AMBRÓS, W.M.; T.D.M. Lanzasova; J.L.S. Fagundes; R.L. Sari; D.K. Pinheiro; M.E.S. Martins; N.P.G. Salau. **Experimental analysis and modeling of internal combustion engine operating with wet ethanol**. Fuel, v. 158, p. 270–278, 2015.

AMORIM, Rogério Jorge. **Análise do aumento da razão volumétrica de compressão de um motor flexível multicomcombustível visando melhoria de desempenho**. 2005. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

ANATER, M.J.N., et al. **Balço energético e emissões de gases de efeito estufa do processo de produção de etanol: um estudo de caso**. Enciclopédia Biosfera, Centro Científico Conhecer – Goiânia, v. 13, n. 24, p. 1634, 2016.

ANP – AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS. **Glossário, 2018**. Disponível em: <https://www.anp.gov.br/glossario> Acesso em: 12 Nov. 2018.

ARRHENIUS, S. **On the influence of carbonic acid in the air upon the temperature of the ground**. The London, Edinburgh and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science S. 5th, v. 41, p. 237-276, 1896.

AVL List GmbH. **AVL BOOST VERSION 2017** - Theory. 2018.

BAËTA, J. G. C.; M. Pontoppidan; T. R. V. Silva. **Exploring the limits of a down-sized ethanol direct injection spark ignited engine in different configurations in order to replace high-displacement gasoline engines**. Energy Conversion and Management, v. 105, p. 858-871, 2015.

BALKI, M. K.; C. Sayin, M. Canakci. **The effect of different alcohol fuels on the performance, emission and combustion characteristics of a gasoline engine**. Fuel, v. 115, p. 901-906, 2014.

BIOENERGIA. **Diesel da cana**. Pesquisa Fapesp, 153, 2008.

BILHÃO, J. A. **Viabilidade técnico-econômica do uso do etanol super-hidratado em motores do ciclo otto**. Mestrado (Dissertação). Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção – Universidade Federal de Santa Maria, 2015.

BREAUX, B. B.; Acharya S. **The effect of elevated water content on swirl-stabilized ethanol/air flames**. Fuel, v. 105, p. 90-102, 2013.

BRITO, Cristiano Henrique Gonçalves de. **Análise do perfil de temperatura no gás de exaustão de um grupo motor-gerador diesel**. 2016. 135 f. Dissertação (Mestrado) - Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

BRITTO, R.J. et al. **Development of heavy-duty Otto cycle engine powered by ethanol**. SAE Technical Paper Series, v. 36, p. 0324, 2013.

BRUSSTAR, M.; M. Sthuldreher; D. Swain; W. Pidgeon. **High Efficiency and Low Emissions from a Port-Injected Engine with Neat Alcohol Fuels**. U.S. Environmental Protection Agency. Society of Automotive Engineers, Inc. 2002-01-2743.

COSTA, R.C.; J.R. SODRÉ. **Hydrous ethanol vs. gasoline-ethanol blend: Engine performance and emissions**. Fuel, v. 89, p. 287-293, 2010.

COSTA, R.C.; J.R. SODRÉ. **Compression ratio effects on an ethanol/gasoline fuelled engine performance**. Applied Thermal Engineering, v. 31, p. 278-283, 2011.

CRÓ, Nelson. et al. **Computational modeling of internal combustion engines: Influence of compression ratio in the indicated performance curves**. SAE International, v. 36, p. 0349, 2013c

DA COSTA, R.B.R.; FILHO, F.A.R.; CORONADO, C.J.R; TEIXEIRA, A.F.; NETTO, N.A.D. **Research on hydrous ethanol stratified lean burn combustion in a DI spark-ignition engine**. Applied Thermal Engineering, v. 139, p. 317-324, 2018.

DARDIOTIS, C.; G. Fontaras; A. Marotta; G. Martini; U. Manfredi. **Emissions of modern light duty ethanol flex-fuel vehicles over different operating and environmental conditions**. Fuel, v. 140, p. 531-540, 2015.

ELMQVIST, C.; F. Lindström; H. E. Ångström; B. Grandin; G. Kalghatgi. **Optimizing engine concepts by using a simple model for knock prediction**. SAE Technical Paper Series, v. 01 p. 3123, 2003.

ERTRAC. **Future light and heavy internal combustion engine powertrain Technologies**. p. 1-75, 2016.

FAGUNDEZ, J.L.S.; N.P.G. Salau. **Avaliação da transferência de calor em um modelo de combustão de duas zonas para o etanol combustível**. XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química, Florianópolis, 2014.

FAGUNDEZ, J.L.S.; R.L. Sari; M.E.S. Martins; N.P.G. Salau. **Comparative analysis of different heat transfer correlations in a two-zone combustion model applied on a SI engine fueled with wet ethanol**. Applied Thermal Engineering, v. 115, p. 22–32, 2017.

FAGUNDEZ, J.L.S.; R.L. Sari; F.D. Mayer; M.E.S. Martins; N.P.G. Salau. **Determination of optimal wet ethanol composition as a fuel in spark ignition engine**. Applied Thermal Engineering, v. 112, p. 317–325, 2017.

GÜNTER, P.M.; C. Schwarz; R. Teichmann. **Combustion engines development – mixture formation, combustion, emissions and simulation**. Heidelberg, Dordrecht, London, New York. Springer, 669p, 2012.

HANSEN, J.E. **The greenhouse effect: impacts on current global temperature and regional heat waves**. Presented to: United States Senate, Committee on Energy and Natural Resources, June 23, 1998.

HAUCK, Etelson Augusto Rosa. **Modelo de simulação para um motor diesel**. 2010. 102 f. Dissertação (Mestrado) - Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

HEYWOOD, John B. **Internal combustion engine fundamentals**. New York, McGraw-Hill, 1780p, 2018.

HEYWOOD, J. B; D. Mackenzie. **On the road toward 2050: Potential for substantial reductions in light-duty vehicle energy use and greenhouse gas emissions**. MIT Energy Initiative Report. Sloan Automotive Laboratory Engineering System Division, 294p, 2015.

IEA STATISTICS. **CO₂ emissions from fuel combustion highlights**. International Energy Agency, ©OECD / IEA, 2017.

IPCC, 2013. **Climate change 2013, the physical science basis, contribution of working group I to the fifth assessment report of the intergovernmental panel on climate change**. [Stocker, T.F., D. Qin, G. –K. Plattner, M. Tignor, S.K. Allen, J. Boschung, A. Nauels, Y. Xia, V. Bex and P.M. Miggley (eds.)] Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, 1535 pp.

JAISWAL, D. et al. **Brazilian sugarcane ethanol as an expandable green alternative to crude oil use**. Nature Climate Change, v. 7, 2017.

JUSTINO, Marco Aurélio Mendes. **Desempenho de um grupo motor-gerador alimentado com óleo diesel, gás natural e hidrogênio**. 2012. 138f. Dissertação (Mestrado) – Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

JUSTINO, Marco Aurélio Mendes. **Operação dinâmica de um grupo motor-gerador nos ciclos diesel e otto sem alterar a razão volumétrica de compressão**. 2018 231 f. Tese (Doutorado) – Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

KHALIQ, A.; S. K. Trivedi; I. Dincer. **Investigation of a wet ethanol operated HCCI engine based on first and second law analyses**. Applied Thermal Engineering, v. 31, p. 1621-1629, 2011.

KIENKE, Uwe; Nielsen, Lars. **Automotive Control System**, ISBN 3-540-23139-0, Springer Berlin Heidelberg New York, 2005.

LANZANOVA, Thompson Diórdinis Metzka. **Experimental investigations of anhydrous and wet ethanol combustion in a spark Ignition engine**. 2017. Thesis (Doctor of Philosophy) – Brunel University London, Department of Mechanical, Aerospace and Civil Engineering, College of Engineering, Design and Physical Sciences, London.

LANZANOVA, T.D.M.; M.D. Nora; H. Zhao. **Performance and economic analysis of a direct injection spark ignition engine fueled with wet ethanol**. Applied Energy, v. 169, p. 230–239, 2016.

LAVOIE, G. A.; BLUMBERG, P. N. **A fundamental model for predicting fuel consumption, NOx and HC emissions of the conventional spark-ignited engine**. Combustion Science and Technology, v. 21, p. 225-258, 1980.

LOPES, M. L. et al. **Ethanol production in Brazil: a bridge between science and industry**. Brazilian Journal of Microbiology, v. 47S, p. 64–76, 2016.

MACK, J.H.; S.M. Aceves; R.W. Dibble. **Demonstrating direct use of wet ethanol in a homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine**. Energy, v. 34, p. 782-787, 2009.

MANUAL DE OFICINA MWM. **Série 229**. MWM Motores Diesel LTDA. ASC Comunicação Técnica, 2005.

MATHWORKS. **Third-Party products and services, AVL Boost**. © 1994-2018 The Math Works, Inc. Disponível em: https://www.mathworks.com/products/connections/product_detail/avl-boost.html Acesso em Dezembro, 2018.

MARTINS, M.; T.D.M. Lanzanova; R. Sari. **Low cost wet ethanol for spark-ignited engines: Further investigations**. SAE Int. J. Fuels Lubr. 8(2): 2015.

MARTINS, M.; T.D.M. Lanzanova. **Full-load Miller cycle with ethanol and EGR: Potential benefits and challenges**. Applied Thermal Engineering, v. 90, p. 274-285, 2015.

MELO, T. C. C. **Análise experimental e simulação computacional de um motor flex operando com diferentes misturas de etanol hidratado na gasolina**. Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2012.

MENDES, Luiz Augusto de Noronha. **Desempenho e emissões de um motor diesel operando com óleo diesel e hidrogênio produzido por hidrólise**. 2012 99 f. Dissertação (Mestrado) - Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

MIGUEL, M. et al. **Presidente da República Diretora-Geral Ministério De Minas E Energia Agencia Nacional Do Petróleo, Gás Natural E Biocombustíveis**. 2018. Disponível em: https://www.anp.gov.br/imagens/publicacoes/anuario-estatistico/2018/anuario_2018.pdf. Acesso em: 14 nov. 2018.

MONTES, Ana Carolina Rodrigues. **Avaliação do processo de obtenção de etanol de 2ª geração utilizado bagaço de cana**. 2017. Monografia (Graduação) – Universidade Federal de Uberlândia, Faculdade de Engenharia Química, Uberlândia.

MOREIRA, Vinícius Gerra. **Desempenho e emissões de um grupo motor gerador originalmente diesel convertido para otto operando com etanol hidratado**. 2019 169 f. Dissertação (Mestrado) - Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica.

MORAIS, André Marcelino de. **Avaliação do desempenho de um motor diesel operando com óleo diesel e hidrogênio**. 2012. 121 f. Dissertação (Mestrado) – Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

MORAIS, André Marcelino de. **Conversão reversível de um motor de ciclo diesel para ciclo otto utilizando etanol hidratado**. 2016. 224 f. Tese (Doutorado) – Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

MORAN M.; Shapiro H. **Fundamentals of Engineering Thermodynamics**. 5º edição, Copyright, 2006.

MUNSIN, R et al. **An experimental study on performance and emissions of small SI engine generator set fuelled by hydrous ethanol with high water contents up to 40%**. Fuel, v. 106, p. 586-592, 2013.

NOH, H. K.; Soo-Young, N. **Effect of bioethanol on combustion and emissions in advanced CI engines: HCCI, PPC and GCI mode - A review**. Applied Energy, v. 208, p. 782-802, 2017.

NOUR, M.; Kosaka, H.; Bady, M.; Sato, S.; Abdel-Rahman, A. K. **Combustion and emission characteristics of DI diesel engine fuelled by ethanol injected into the exhaust manifold**. Fuel Processing Technology, v. 164, p. 33-50, 2017

NOVA CANA. **A realidade do carro a etanol e o puro elétrico**. Júlio Cesar Verdana, novaCana.com, 2018. Disponível em: <https://www.novacana.com/n/combate/carro-eletrico/realidade-carro-etanol-puro-eletrico-250118> Acesso em: 14 dez. 2018.

NOVA CANA. **Custo é barreira para uso do bioquerosene de cana em aviões, diz especialista.** novaCana.com, 2017. Disponível em: <https://www.novacana.com/n/industria/tecnologia/custo-barreira-uso-bioquerosene-cana-avioes-030417> Acesso em: 14 jan. 2019.

OLIVEIRA, Alex de. **Desempenho e emissões de um motor diesel utilizando diferentes técnicas de injeção de etanol.** 2015. 229 f. Dissertação (Mestrado) - Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

OLIVEIRA, Alex de. **Análise dos efeitos do tempo de injeção direta de etanol em um motor diesel adaptado para operação bicombustível.** 2018 287 f. Tese (Doutorado) - Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

ONORATI, A.; G. Ferrari; G. D'errico. **1D Unsteady Flows with Chemical Reactions in the Exhaust Duct-System of S.I. Engines: Predictions and Experiments.** SAE Technical Paper Series, v. 01 p. 0939, 2001.

PACHECO, T. F. **Produção de etanol: primeira ou segunda geração?** Circular Técnica Embrapa, Brasília, ISSN 2177-4420. Disponível em: <https://www.infoteca.cnptia.embrapa.br/bitstream/doc/886571/1/CITE04.pdf> Acesso em: 14 nov. 2018.

PATTAS K.; HÄFNER G. **Stickoxidbildung bei der ottomotorischen Verbrennung.** MTZ No. 12, 397-404, 1973.

PAULINO DE SOUZA, J. **Improvement of Brazilian bioethanol production – Challenges and perspectives on the identification and genetic modification of new strains of *Saccharomyces cerevisiae* yeasts isolated during ethanol process.** Fungal Biology, v. 122, p. 583-591, 2018.

PETROBRAS. **Ficha de Informação de Segurança de Produto Químico-FISPQ-Etanol Hidratado Combustível.** 2018. Disponível em: <http://www.br.com.br/wcm/connect/0b7e2011-1025-4785-bfd9-d3b78f1e44cf/fispq-comb-etanol-etanol-anidro-combustivel-eac.pdf?MOD=AJPERES&CVID=mbuZhJI&CVID=IZfF75> Acesso em: 14 jan. 2019.

PETROBRAS. **Ficha de Informação de Segurança de Produto Químico-FISPQ-Etanol Anidro Combustível.** 2018. Disponível em: <http://www.br.com.br/wcm/connect/0b7e2011-1025-4785-bfd9-d3b78f1e44cf/fispq-comb-etanol-etanol-anidro-combustivel-eac-rev02.pdf?MOD=AJPERES&CVID=ILpYrsR> Acesso em: 14 jan. 2019.

PULLKRABEK, W. W. **Engineering fundamentals of internal combustion engine.** New York: Prentice Hall, 2003.

RAHMAN K. M.; N. Kawahara; K. Tsuboi; E. Tomita. **Combustion characteristics of wet ethanol ignited using a focused Q-switched Nd: YAG nanosecond laser.** Fuel, v. 165, p. 331-340, 2016.

ROSO, V. R., et al. **Consumo de combustível e emissões de poluentes em um motor Diesel convertido a etanol para geração térmica de energia elétrica**. *Semana: Ciências Exatas e Tecnológicas*, v. 37, p. 131-142, 2016.

SARATHY, S. M., OßWALD, P., HANSEN N., KOHSE-HÖINGHAUS, K. **Alcohol combustion chemistry**. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 44, p. 40-102, 2014.

SARI, R. L., et al. **Exploring optimal operating conditions for wet ethanol use in spark ignition engines**. *Applied Thermal Engineering*, v. 138, p. 523-533, 2018.

SARI, R. L. **Avaliação da utilização de etanol com elevados teores de água em motores de combustão interna com ignição por centelha**. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica – UFRGS; 2017

SAXENA, S., Schneider, S., Aceves, S., & Dibble, R. **Wet ethanol in HCCI engines with exhaust heat recovery to improve the energy balance of ethanol fuels**. *Applied energy*, v. 98, p. 448-457, 2012.

SAXENA, S. et al. **Optimal operating conditions for wet ethanol in a HCCI engine using exhaust gas heat recovery**. *Applied Energy*, v. 116, p. 269–277, 2014.

SEMENTA, P., Vaglieco, B. M., Catapano, F. **Thermodynamic and optical characterizations of a high performance GDI engine operating in homogeneous and stratified charge mixture conditions fueled with gasoline and bio-ethanol**. *Fuel*, v. 96, p. 204-219, 2012.

SILVA, Márcio José da. **Avaliação de parâmetros da combustão a partir da medição da pressão no cilindro de um motor diesel**. 2016. 128 f. Dissertação (Mestrado) - Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

SKORPIK. J. **Transformacni technologie**, 2016.

SOUZA, Ivair Carvalho de. **Desempenho e emissões de um motor acoplado a um gerador de energia elétrica operando com injeção direta de óleo diesel e etanol sobre hidratado**. 2018. 179 f. Dissertação (Mestrado) - Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

STEFFEN, W. et al. **Trajectories of the earth system in the Anthropocene**. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 115, n. 33, p. 8252–8259, 2018.

SEEG. Sistema de Estimativa de Emissões de Gases de Efeito Estufa. **Emissões dos Setores de Energia processos Industriais e uso de Produtos**. Disponível em: <<https://www.seeg.eco.br>>. Acesso em 21 nov. 2018.

TAVARES, J. R. et al. **Detection of greenhouse gas precursors from ethanol powered vehicles in Brazil**. *Biomass and bioenergy*, v. 16, p. 46–52, 2014.

TRIVEDI, S. K.; HALEEM, A. **Thermodynamic analysis and utilization of wet ethanol in homogeneous charge compression ignition engine**. International Journal of Sustainable Energy, v. 35, n. 1, p. 33–46, 2016.

ULHÔA, F.C.P.; CAMPOLINA, M.A.M.; AMORIM, R.J.; PORTILHO, G.A.C. **Computational simulation of a high performance ethanol engine adapted for Formula SAE**. 25th SAE BRASIL International Congress and Display São Paulo, Brasil, October 25th to 27th. SAE Technical Papers Series, 2016-36-0123.

UNICA, União da Indústria de Cana-de-Açúcar. **Sustentabilidade, bioquerosene de cana se torna uma realidade e deve ajudar a aviação com suas metas de redução de CO₂**. 2014. Disponível em: <<http://www.unica.com.br/noticia/1108734492039273619/bioquerosene-de-cana-se-torna-uma-realidade-e-deve-ajudar-a-aviacao-com-suas-metas-de-reducao-de-co2/>> Acesso em: 14 jan. 2019.

UNITED NATIONS ENVIRONMENT PROGRAME. **Understanding the IPCC special report on 1.5°C**. p. 12, 2018.

VALENTE, Osmano Souza. **Desempenho e emissões de um motor-gerador de energia elétrica operando com biodiesel**. Dissertação (Mestrado) – Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Belo Horizonte, 139 f., 2007.

WOSCHNI, G. A. **Universally Applicable Equation for the Instantaneous Heat Transfer Coefficient in Internal Combustion Engines**. SAE 6700931, 1978.

WATANABE, M.D.B. et al. **Hybrid input-output life cycle assessment of first-and second-generation ethanol production technologies in Brazil**. Journal of Industrial Ecology, Yale University, 2015.

WHITE, M. Frank. **Fluid Mechanics**. McGraw-Hill, 7th ed. 2011.

WMO. **Greenhouse gas bulletin – The state of greenhouse gases in the atmosphere based on global observations through 2016**. World Meteorological Organization, Global Atmosphere watch, n. 13, 2017.

WMO. **Greenhouse gas bulletin – The state of greenhouse gases in the atmosphere based on global observations through 2017**. World Meteorological Organization, Global Atmosphere watch, n. 14, 2018.

APENDICE A - Planos de simulação e validação do modelo numérico

Plano de Simulação para os Parâmetros de Desempenho

Comb.	\dot{m}_a (kg/h)			\dot{m}_f (kg/h)			SFC			Eficiência			ON [-]	T (Nm)	P (kW)
	Sim.	Exp.	Dif. (%)	Sim.	Exp.	Dif. (%)	Sim.	Exp.	Dif. (%)	Sim.	Exp.	Dif. (%)			
EHC															
EHC10															
EHC20															
EHC30															
EHC40															

Fonte: Elaborado pelo autor

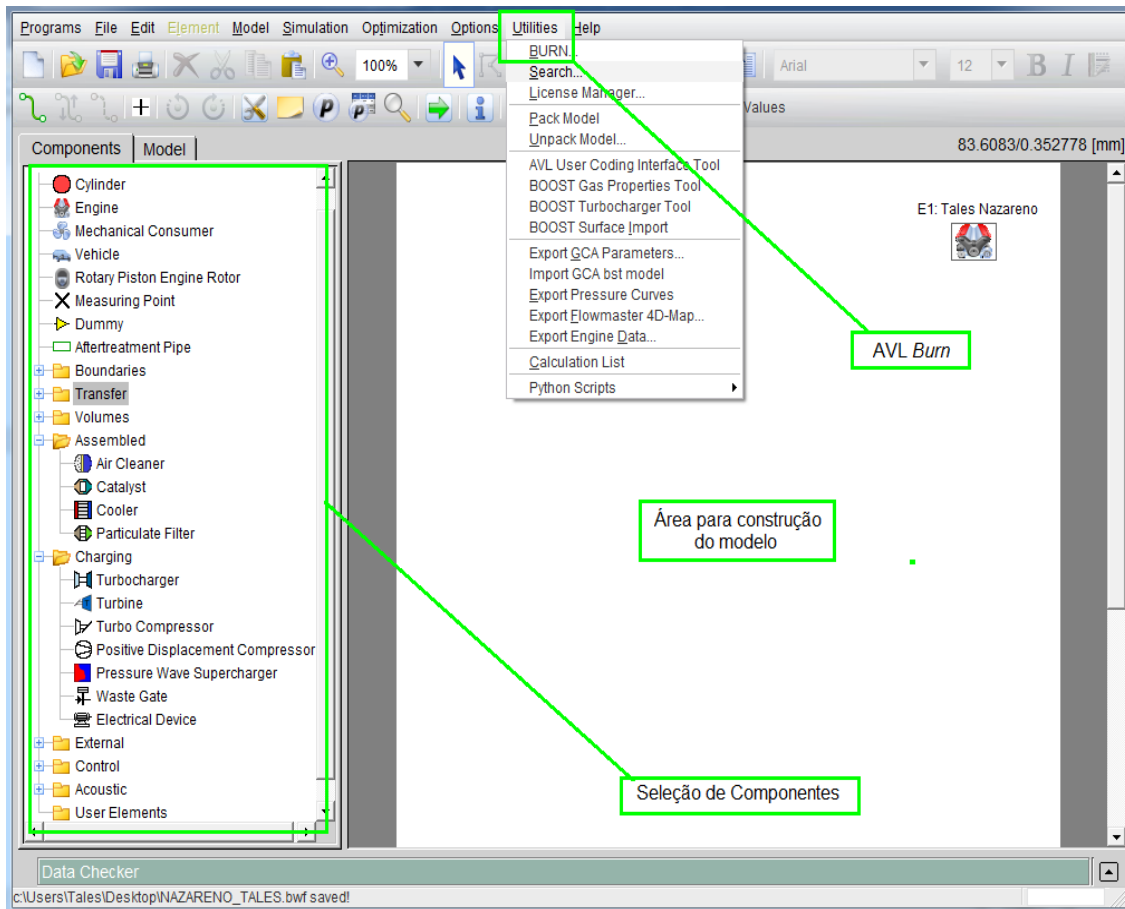
Plano de simulação dos parâmetros de emissões

Plano de Simulação para os Parâmetros de Emissões

Combustível	CO			HC			NOx		
	Sim.	Exp.	Dif. (%)	Sim.	Exp.	Dif. (%)	Sim.	Exp.	Dif. (%)
EHC									
EHC10									
EHC20									
EHC30									
EHC40									

Fonte: Elaborado pelo autor

ANEXO A - Tela inicial do AVL BOOST



Fonte: Dado da pesquisa

