
Análise Quasi-Dimensional da Combustão em Motores ICE Utilizando a Cinética Química das Reações

Lucas Fernando Ribeiro Chaves



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Uberlândia
2017

Lucas Fernando Ribeiro Chaves

**Análise Quasi-Dimensional da Combustão
em Motores ICE Utilizando a
Cinética Química das Reações**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia Mecânica.

Área de concentração: Sistemas Térmicos.

Orientador: Prof. Dr. Arthur Heleno Pontes Antunes

Uberlândia

2017

Lucas Fernando Ribeiro Chaves

Análise Quasi-Dimensional da Combustão em Motores ICE Utilizando a Cinética Química das Reações

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia Mecânica.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Arthur Heleno Pontes Antunes
(Orientador - UFU)

Prof. Dr. Alexandre Zuquete Guarato
(Avaliador 1 - UFU)

Msc. Letícia Raquel de Oliveira
(Avaliador 2 - UFU)

Uberlândia, 26 de outubro de 2017.

*Este trabalho é dedicado aos meus grandes amigos,
David e Juliet Tschida.*

AGRADECIMENTOS

Primeiramente gostaria de agradecer a Deus, pelas inúmeras oportunidades de aprimoramento moral e intelectual que Ele sempre me ofertou.

Agradeço aos meus pais e a meu irmão, os quais me propiciaram estabilidade financeira e sobre tudo afetiva, de modo que eu fosse capaz de alcançar - por meio de muito esforço - o sonhado título de engenheiro.

Agradeço a todos os professores e amigos, que durante meu intercâmbio internacional na University of Wisconsin, se dedicaram a me ensinar tanto a língua inglesa como os conteúdos relacionados a engenharia mecânica; dentre estes amigos, gostaria de agradecer de forma especial a família Tschida, que me recebeu de maneira muito carinhosa, dando-me o suporte necessário durante o meu período de graduação nos Estados Unidos.

Agradeço ao professor Adilson J. de Assis, docente da Faculdade de Engenharia Química - UFU, pela orientação no projeto de estágio curricular, e sobretudo pelos inúmeros conselhos de vida.

Por fim, agradeço imensamente ao meu orientador, Prof. Dr. Arthur Heleno Pontes Antunes, pela confiança e apoio para a realização deste trabalho.

RESUMO

O presente trabalho desenvolveu um estudo aprofundado sobre o atraso químico da combustão em motores do ciclo Otto, alimentados com iso-octano. Tal estudo foi realizado por meio de simulações computacionais utilizando algoritmo implementado em linguagem de programação Scilab, o qual sofreu modificações pontuais no decorrer do projeto, de modo a ajustar dados simulados às características reais de veículos automotores. O modelo quasi-dimensional da combustão foi utilizado no desenvolvimento do código fonte visando eliminar erros característicos dos modelos teóricos e zero-dimensional. Para a análise da cinética química do problema, foi feita uma associação entre o algoritmo numérico desenvolvido por Bertoldi (2007) e o conjunto de reações químicas provenientes da combustão do iso-octano, propostas pelos experimentalistas Ming Jia e Mao-zhao (2006). A utilização dos modelos mencionados somado a intensa revisão teórica, permitiu que este trabalho atingisse os objetivos de modelar um motor de combustão a centelha, de modo a estabelecer o atraso químico da combustão neste sistema e por consequência, o ângulo de avanço ideal de ignição no mesmo. Tais características foram validadas após comparação entre curvas de potência de três diferentes automóveis, das quais não houveram erros superiores a 11%.

Palavras-chave: Motor de combustão interna, ciclo Otto, combustão, curvas de potência.

ABSTRACT

This present work developed a deep study about combustion chemical delay in Otto cycle engines, fed with iso-octane. Such study has being made by computational simulations using an algorithm developed in Scilab programing language, which one has undergone especific modifications during the project, in order to adjust simulated data to the real motor vehicles characteristics. The quasi-dimensional combustion model was used in the source code development aiming to avoid typical mistakes of theoretical and non-dimensional models. To the chemical kinetic analysis of the problem, was made a link association between the numerical algorithm developed by Bertoldi (2007) and the group of chemical reactions from iso-octane combustion, proposed by Ming Jia and Mao-zaho (2006). The use of the mentioned models added to the intesive theoretical review, allowed this work achieving the goal of modeling a spark combustion engine, in order to establish the combustion chemical delay into that system and consequently, the ideal ignition advance angle. Such features were validated after comparison between power curves of three different vehicles, which there were no errors higher than 11%.

Key-words: Internal combustion engines, Otto cycle, combustion, power curves.

LISTA DE FIGURAS

1	Os quatro tempos do motor alternativo operando sob o ciclo Otto.	13
2	Ciclo Otto para os diagramas P <i>versus</i> V e T <i>versus</i> S.	14
3	Os quatro tempos dos motores alternativos operando sob o ciclo Otto. . . .	15
4	Volume de controle à pressão constante.	20
5	Energia livre de Gibbs para o equilíbrio químico de CO_2	26
6	(a) Colisões em uma reação química e (b) $U_{potencial}$ <i>versus</i> $E_{ativação}$	28
7	(a) Combustão normal, (b) auto-ignição e (c) detonação.	29
8	Relação geométrica do pistão.	31
9	Função em Scilab para o cálculo do volume total.	32
10	Configuração geométrica das válvulas de admissão e escape.	33
11	Sistema de equações para a abertura e fechamento das válvulas.	35
12	(a) Comprimento característico não queimado e (b) frente de chama. . . .	37
13	Caminhos prioritários para a reação de queima do iso-octano.	38
14	Pressão <i>versus</i> ângulo de giro.	44
15	Pressão <i>versus</i> ângulo de giro, com presença de detonação.	45
16	Pressão <i>versus</i> ângulo de giro, com máxima pressão para o modelo.	46
17	Rendimento <i>versus</i> ângulo de combustão.	47
18	Potência de Saída <i>versus</i> Rotação.	47
19	Frações molares de dióxido e monóxido de carbono.	48
20	Frações molares de água e hidrogênio.	49
21	Frações residuais de nitrogênio.	49
22	Frações molares de oxigênio.	50
23	Frações molares de oxigênio e óxido nitroso.	50
24	Frações molares de hidróxido e hidrogênio.	51
25	Potência <i>versus</i> rotação para V1, V2 e V3 experimentais.	52
26	Curva de potência <i>versus</i> rotação V1, V2 e V3 simulados.	53
27	Curva normalizada de potência <i>versus</i> rotação para V1.	54

28	Curva normalizada de potência <i>versus</i> rotação para V2.	55
29	Curva normalizada de potência <i>versus</i> rotação para V3.	55

LISTA DE TABELAS

1	Relação de equivalência ar-combustível.	23
2	Espécies envolvidas na combustão do iso-octano.	27
3	Relação de proporcionalidade da equação dos gases ideais para dois casos. .	33
4	Reações de equilíbrio químico e suas constantes.	41
5	Parâmetros de simulação.	43
6	Tabela rendimento da combustão por ângulo de combustão.	46
7	Tabela comparativa de potência experimental e simulada para V1, V2 e V3.	56

SUMÁRIO

1	Introdução	12
1.1	Aspectos Preliminares	12
1.2	Motores a Combustão Interna	13
1.2.1	Caracterização	13
1.2.2	Ciclo Otto	14
1.2.3	Motores de ignição a centelha (ICE)	15
1.3	Conceito de combustão	16
1.4	Objetivos	17
2	Revisão Bibliográfica	19
2.1	Propriedades Termodinâmicas	19
2.1.1	Entalpia	20
2.1.2	Entalpia de reação	21
2.1.3	Estequiometria de reação	22
2.2	Entropia	23
2.2.1	Equilíbrio químico	24
2.3	Cinética química das reações	26
2.4	Ignição e Auto-Ignição	28
3	Metodologia Matemática e Computacional	30
3.1	Geometria do Motor ICE	30
3.1.1	Avaliação geométrica quanto ao volume	30
3.1.2	Avaliação da área de abertura/fechamento das válvulas	33
3.2	Modelos Computacionais para a Combustão	35
3.2.1	Modelo quasi-dimensional	36
3.2.2	Modelo para o atraso químico da combustão	38
3.2.3	Modelo para o deslocamento de equilíbrio químico	40

4	Resultados e discussões	42
4.1	Parâmetros de Simulação	42
4.2	Curvas de Potência e Rendimento	44
4.3	Frações Residuais	48
4.4	Resultados Simulados <i>versus</i> Experimentais	52
5	Conclusão	58
6	ANEXOS	62
6.1	Anexo 1 : Características geométricas e operacionais	62

1 INTRODUÇÃO

1.1 Aspectos Preliminares

O estudo dos ciclos térmicos aplicados à geração de movimento é sem dúvida um dos tópicos mais estudados em engenharia. Desde o período pré-industrial até o da revolução da informação as máquinas térmicas têm tido influência direta e indireta na dinâmica social e, portanto, na econômica mundial. Durante a primeira revolução industrial, conduzida pela Inglaterra no século XVIII, a crescente demanda por utensílios manufaturados, em especial aqueles de utilidade bélica, impulsionaram a transição dos modelos agrário e artesanal de produção para os de caráter industrial. Tais alterações ocorridas nos setores de produção tiveram estreito vínculo com o desenvolvimento das máquinas a vapor e com os motores a combustão interna.

Neste contexto o investimento em pesquisas voltadas para a descrição e aprimoramento do mecanismo de obtenção de energia (combustão) térmica, pode ser visto como fator determinante para o desenvolvimento industrial e econômico da atualidade.

Setores industriais, em especial as industriais de base e automobilística, têm mostrado cada vez mais interesse no controle da energia despendida durante a queima de combustíveis derivados do petróleo e no controle dos gases residuais gerados neste processo. Uma vez que, a produção de resíduos gasosos ligados ao carbono representa perda de energia útil ao sistema, causando não apenas prejuízos econômicos, mas também danos à saúde dos indivíduos.

Segundo Drumm *et al* (2014) “no Brasil 32% das emissões de carbono são originadas pelas atividades de transporte”. Este dado evidencia a importância do estudo da combustão em ciclos motores de modo a torná-los mais eficientes e menos poluentes.

Desta forma, a simulação numérica aplicada ao processo de combustão dos motores endotérmicos, em especial nos de ignição por centelha (ICE), é uma ferramenta imprescindível para a otimização do rendimento destas máquinas térmicas. Assim, por meio das

curvas características dos gases residuais e de potência, torna-se possível propor valores ótimos para as diversas variáveis envolvidas no processo de combustão dos motores ICE.

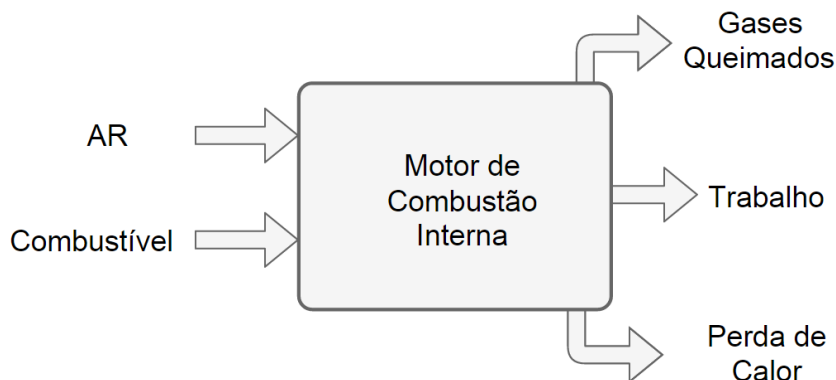
1.2 Motores a Combustão Interna

1.2.1 Caracterização

Motores de combustão interna são sistemas mecânicos projetados com a finalidade de converter energia química em trabalho mecânico de eixo. Podendo ter como combustíveis substâncias sólidas ou líquidas.

O processo de combustão nestes motores (Figura 1) ocorre pela variação da pressão na câmara de combustão ou pela inserção de energia externa à mistura ar-combustível tornando-a reativa. Desta forma, múltiplas reações químicas ocorrem dando origem aos gases queimados (residuais), ao trabalho de eixo e a uma porção de calor que se perde pelas paredes do sistema combustor.

Figura 1: Os quatro tempos do motor alternativo operando sob o ciclo Otto.



Fonte: O autor (2017).

A combustão em motores endotérmicos é comumente descrita para dois sistemas: os motores de ignição a centelha (ICE) e os motores de ignição à compressão (ICO). Em motores de ignição a centelha, foco deste trabalho, a combustão é promovida por uma fonte de ignição externa (vela de ignição), a qual em determinado momento da etapa de compressão emite faíscas que em contato com a mistura ar - combustível dão início ao processo de combustão. Apesar da suposta simplicidade, este sistema de ignição apresenta grandes desafios na determinação ideal ou ótima do ponto de centelhamento ou atraso de ignição. O qual deve ser determinado para que seja possível extrair o melhor desempenho do processo de combustão, e paralelamente, evitando a formação de gases residuais nocivos a saúde dos seres vivos.

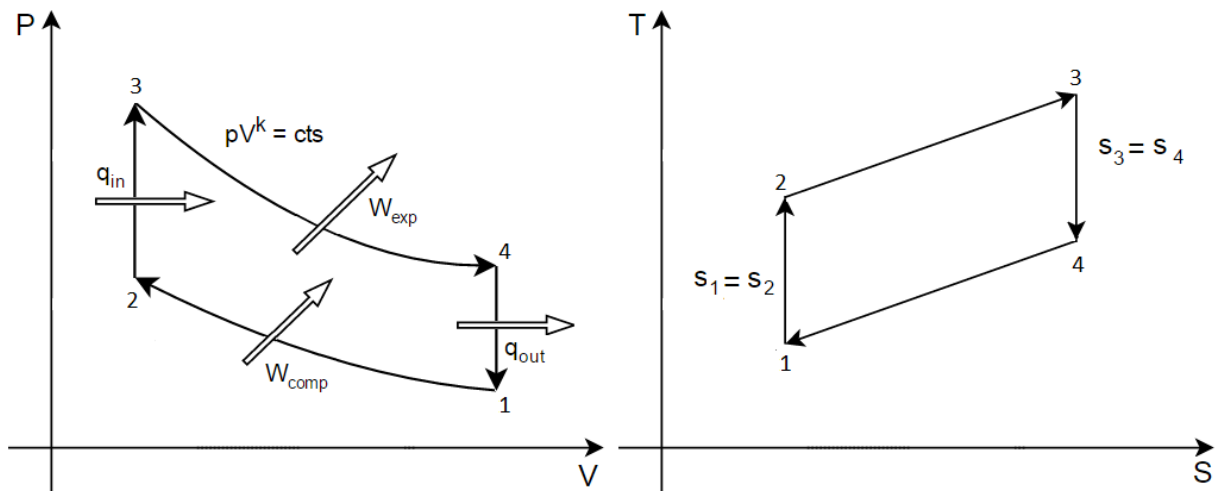
Já a combustão por compressão (ICO) tem início após a ruptura dos limites de octa-

nagem da mistura, sendo promovida pela elevada pressão entre combustível e oxidante na câmara de combustão (CC). Neste sistema o combustível é injetado a altas pressões na CC durante a etapa de compressão, de forma a produzir choques reativos entre os componentes químicos da mistura, aumentando consideravelmente a pressão e temperatura do sistema até que a combustão inicie e promova a liberação de energia em forma de calor e resíduos gasosos.

1.2.2 Ciclo Otto

O ciclo Otto, proposto por Nikolaus Otto em 1876, é o ciclo padrão de motores de ignição a centelha (ICE). Neste ciclo, as transformações cíclicas descrevem uma sequência bem definida de estágios, ou transformações térmicas que compõem os quatro tempos do motor ICE.

Figura 2: Ciclo Otto para os diagramas P versus V e T versus S .



Fonte: O autor (2017).

Desta forma, podemos definir por conceitos termodinâmicos cada estado do ciclo da seguinte maneira:

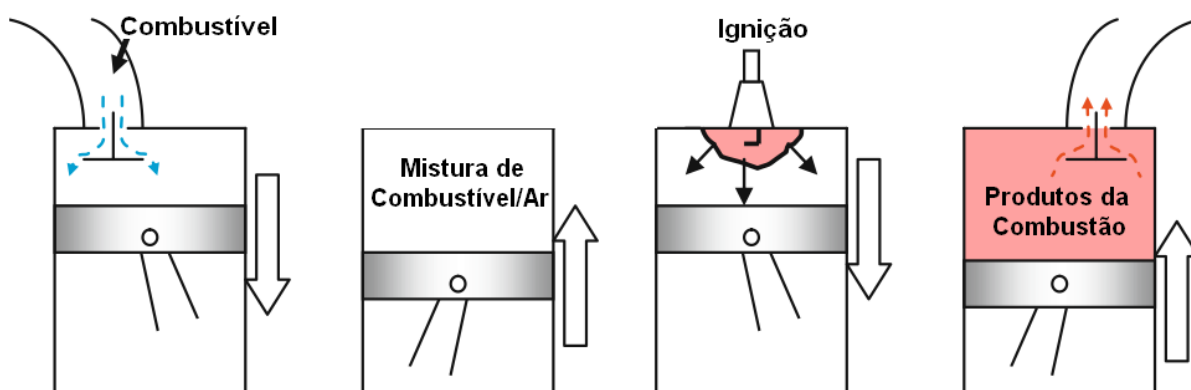
- 1 $\rightarrow$ 2: Compressão adiabática reversível;
- 2 $\rightarrow$ 3: Aquecimento isométrico reversível do ar;
- 3 $\rightarrow$ 4: Expansão adiabática reversível do ar;
- 4 $\rightarrow$ 1: Arrefecimento isométrico reversível do ar.

1.2.3 Motores de ignição a centelha (ICE)

Os motores de ignição a centelha são sistemas térmicos que operam de acordo com o ciclo termodinâmico Otto, sua utilização é comumente visualizada em veículos motores de pequeno e médio porte devido à moderada disponibilidade de potência em função da energia liberada durante a combustão. Neste ciclo motor, ficam evidente quatro etapas distintas e identificadas como: Admissão (1), Compressão (2), Expansão (3) e Escape (4). Em ciclos ideais, entretanto, o 3º tempo é tido como expansão. Pois, a combustão é tomada como perfeita e instantânea, queimando toda a mistura de uma só vez e transformando a energia térmica integralmente em trabalho de eixo, e sem a produção de gases residuais.

A seguir, temos a representação dos ciclos motores de um motor de quatro tempos ICE.

Figura 3: Os quatro tempos dos motores alternativos operando sob o ciclo Otto.



Fonte: Michael Liberman (2008), **alterada**.

1º tempo:

A primeira etapa, a de admissão, tem início no momento em que a base superior do êmbolo do pistão está alinhada com o ponto morto superior (PMS). Neste instante, a válvula de admissão começa - de forma progressiva - a permitir a entrada de ar, de modo que o ar succionado preencha a câmara à medida que o pistão desloca-se em direção ao ponto morto inferior (PMI). Chegando ao PMI, a válvula de admissão fecha.

2º tempo:

A segunda etapa, denominada de compressão, é consecutiva ao fim da admissão. Nesta, tanto a válvula de admissão como de escape estão fechadas e o pistão desloca-se do PMI para o PMS, de modo a comprimir a mistura.

3º tempo:

A combustão é a terceira, e mais importante etapa dos ciclos motores. Nesta etapa, a mistura de ar-combustível e frequentemente de gases residuais (ciclos não ideais) sofrem variações volumétricas, promovendo o deslocamento do pistão do PMS para o PMI. Esse deslocamento é de fato o trabalho útil entregue ao eixo virabrequim.

4º tempo:

O quarto, e último tempo do ciclo motor tem início após a chegada do pistão ao PMI, ao fim da combustão. Nesta etapa, a câmara de combustão teoricamente tem o volume total preenchido por gases residuais de combustão, os quais são expulsos pela diferença de pressão produzida pela abertura da válvula de escape e pelo movimento ascendente do pistão em sentido ao PMS.

1.3 Conceito de combustão

O conceito de combustão, assim, como para muitos outros processos físicos e químicos é bastante amplo, e frequentemente, feito pela análise direta dos resultados finais obtidos. Assim, podemos assumir que a queima da mistura ar-combustível (A/F), em termos gerais é o evento responsável pela definição usualmente associada ao processo de combustão. Uma vez que, esta análise proporciona estimativas razoáveis da variação energética da mistura após a queima do combustível e término da combustão.

Neste sentido, pode-se definir a combustão como um processo instantâneo de consumo ou interação de compostos reativos, que ao fim deste, gera energia em diversas formas e frequências (TURNS *et al*, 1996).

Essa definição, apesar de intuitiva e com boa aproximação quantitativa é carregada de equívocos conceituais, tais como:

- I. Os resíduos da combustão são estáveis;
- II. A combustão ocorre em uma única etapa, global e irreversível, e;
- III. A queima da mistura A/F é completa e instantânea.

Estes equívocos são irrelevantes, quando se deseja puramente definir a combustão ou explicar a queima não confinada de misturas. No entanto, quando aplicada ao processo de queima ocorrido em sistemas mecânicos complexos, nos quais cada variação de massa e energia promove ou amplifica erros, a definição global sobre a combustão é inaceitável.

Neste sentido, devemos adaptar o conceito de combustão aferido pelo senso comum. De modo que, sua aplicabilidade seja estendida a sistemas mais complexos, tais como, os

motores de ignição a centelha.

Nos motores ICE o conceito mais apropriado para a combustão é aquele que evidência a existência das múltiplas etapas reacionais, e a influência que estas têm no balanço final de energia e massa.

Desta forma, a definição de combustão mais adequada e proposta por este trabalho é a que se refere a um processo físico-químico em série, composto por múltiplas etapas (diretas e inversas) as quais se processam em quantidades diretamente associadas à pressão e temperatura do volume de controle em análise; e por fim, devido ao consumo parcial da mistura de combustão, liberam energia térmica, a qual é transmitida pela inércia mássica dos gases residuais do processo ao sistema mecânico e pelas paredes deste sistema.

Por mais complexa que possa ser a definição proposta neste trabalho, esta fornece a melhor base teórica para compreendermos a cinética química, o deslocamento de equilíbrio e os produtos finais da combustão. Isto, pois, a combustão não é um processo singular, visto que, mudanças nas condições de operação terão acentuada influência no balanço energético e mássico para este processo; podendo mudar drasticamente a somatória final de calor liberado pelo conjunto reacional.

Assim, devido à complexidade da combustão o estudo computacional deste fenômeno em motores de ignição a centelha é uma das alternativas de menor custo no mercado, sendo atrativa pela baixa demanda computacional em comparação com as simulações fluidodinâmicas, e de fácil modificação das geometrias e parâmetros analisados quando comparados com modelos de bancadas experimentais. Neste sentido, os modelos matemáticos da combustão para motores endotérmicos somados as equações da cinética química são de extrema importância para o real entendimento e predição das características de funcionamento dos motores a combustão interna e para outros sistemas similares.

1.4 Objetivos

O presente trabalho tem como objetivo central o desenvolvimento de um algoritmo computacional em linguagem de programação Scilab, que por meio das equações fundamentais da termodinâmica, do equilíbrio químico e das equações da cinética química, estime o ponto ótimo da combustão em motores do tipo ICE. Desta forma, o termo que caracteriza o 3º tempo motor do ciclo Otto real (processo de combustão) será recorrente neste trabalho, visto que, alterações mínimas das condições de sucção da mistura ar - combustível tem significativo impacto no trabalho efetivo do ciclo e na formação dos gases residuais, variáveis de saída representadas na Figura 1.

Assim, o modelo computacional construído fornecerá os ângulos ideais de combustão para a mistura explosiva e as frações molares dos gases residuais formados. De forma complementar será realizado o estudo das curvas de potência e rendimento para o sistema em análise, estabelecendo comparações com dados experimentais existentes e também,

com resultados obtidos por códigos computacionais de outros autores.

Neste sentido, o trabalho apresentará na seção 2 uma extensa revisão bibliográfica sobre conceitos termodinâmicos e de cinética química das reações. Na sequência tem-se o desenvolvimento matemático aplicado ao código computacional criado. Por fim, será feita uma avaliação dos resultados obtidos com possíveis causas de erros ou aprimoramento tecnológico frente aos dados existentes na literatura.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nesta seção serão discutidos os conceitos mais relevantes sobre a termodinâmica clássica, de modo a estabelecer a base teórica utilizada no decorrer do trabalho. Também serão utilizados dados experimentais disponíveis na literatura, que modelam casos da cinética química das reações, para exemplificar e validar modelos reduzidos de velocidade da combustão do iso-octano e outros combustíveis. Por fim, conceitos de ignição e auto-ignição de combustível fósseis serão pontuados com as devidas equações propostas por experimentalistas.

2.1 Propriedades Termodinâmicas

A termodinâmica como conceito fundamental das ciências térmicas, estabelece as variações de energia da matéria, correlacionando-as a estados termodinâmicos bem definidos.

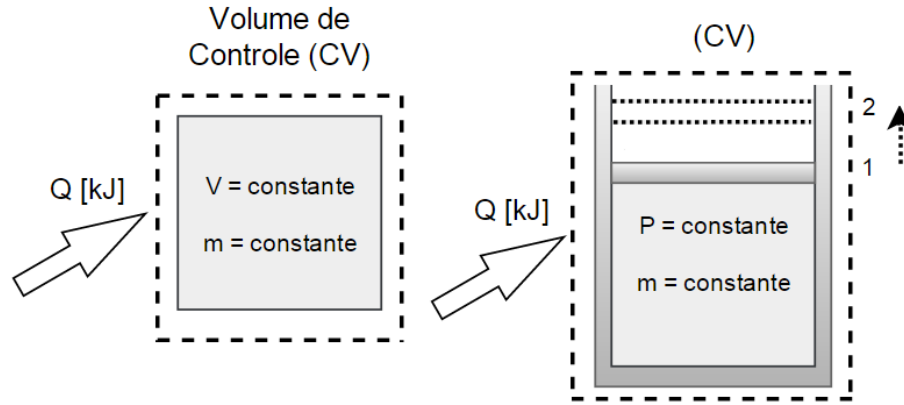
Tomando como exemplo as substâncias puras, verifica-se que com duas ou mais propriedades termodinâmicas (entalpia, entropia, título, calor específico ou número de mols) é possível obter a característica físico-química ou o estado termodinâmico da substância em análise. Por meio deste conceito, pode-se então, determinar as frações mássicas e de energia de um sistema reacional.

Note que, a determinação destes fatores é feita para pontos específicos das reações químicas, onde a variação temporal não tem influência significativa, e assim, os conceitos termodinâmicos clássicos se mantêm válidos. Contudo, para regiões onde há variação temporal, serão utilizado as relações de cinética química de modo a determinar de forma exata a quantidade de matéria processada e a quantidade de energia consumida ou liberada no sistema de controle.

2.1.1 Entalpia

Para a termodinâmica clássica a entalpia é a grandeza física que mensura a máxima energia de um sistema termodinâmico, no qual, as variações de temperatura do conjunto (sistema mais vizinhanças) ocorrem à pressão constante, gerando uma variação de energia total no sistema de controle (SC). Assim, considerando um volume de controle (VC) fechado, como na figura a seguir.

Figura 4: Volume de controle à pressão constante.



Fonte: A. Çengel e M. A. Boles (2006), **alterada**.

Teremos as seguintes equações para o volume de controle:

$$Q = U - W = H \quad (1)$$

$$-W = (PV) \quad (2)$$

$$H = U + (PV) \quad (3)$$

$$dH = dU + P(dV) \quad (4)$$

Verifica-se que a variação infinitesimal do VC, pela adição de calor (Q) não promove variação da pressão dentro cilindro. De modo que, a soma do trabalho (PdV) realizado pela substância ao deslocar o êmbolo, levando-o de (1) para (2) mais a energia interna da própria substância em análise, tem como resultado a entalpia da espécie confinada.

Desta forma, é evidente que o conceito clássico empregado à entalpia é apropriado para o cálculo do trabalho produzido por um gás ou volume de matéria quando a variação volumétrica é mínima. No entanto, em sistemas motores onde se assume um diferencial de volume em relação ao trabalho produzido, a pressão não se mantém constante durante todo o processo de combustão. Para estes sistemas, deve-se, então, usar o conceito de entalpia de reação.

2.1.2 Entalpia de reação

De acordo com a Lei de Conservação da Energia, enunciada por Lavoisier, energia não é criada e nem destruída, mas convertida e transferida de um corpo material - ou inercial - a outro de menor energia total. Assim, é razoável inferir que:

- A energia liberada de uma reação química não foi criada, e sim perdida, como resultado da quebra das ligações interatômicas dos reagentes.
- A energia absorvida durante uma reação química não foi destruída, mas, utilizada na reestruturação das ligações interatômicas dos produtos da reação.

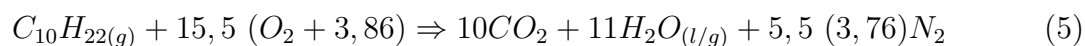
Utilizando a lei mencionada, mas agora, aplicando-a para um sistema fechado, como é o caso do cilindro de combustão dos motores endotérmicos, pode-se dizer que as reações que se processam neste sistema térmico têm no mínimo duas entalpias, as entalpias dos produtos (H_p) e a dos reagentes (H_r).

Da mesma forma, como feito para as entalpias dos reagentes e produtos, é natural nomear o sentido do fluxo de energia após o processamento de uma reação química. Assim, etapas reacionais que tendem a perder energia são conhecidas como reações exotérmicas, e reações que recebem energia térmica para a reordenação de suas ligações químicas, são conhecidas como reações endotérmicas.

As reações de combustão em motores à combustão são em sua maioria exotérmicas, visto que, seria um contracenso converter energia mecânica em térmica para a obtenção de determinada molécula e/ou estrutura química. Isto, do ponto de vista dos motores à combustão.

Contudo, é importante verificar que os sistemas químicos, ou seja, conjunto de todas as etapas - como no caso da combustão - podem ter reações às quais têm o inverso do fluxo energético, reações endotérmicas.

Para verificar qual o fluxo de energia de uma determina reação utiliza-se o somatório das entalpias dos reagentes com a entalpia dos produtos, como na equação a seguir:



$$\Delta H_{reação} = H_{produtos} - H_{reagentes} \quad (6)$$

Caso a reação tenha $\Delta H_{reação} < 0$, então ela será uma reação endotérmica. Mas se $\Delta H_{reação} > 0$, então, a reação é exotérmica.

A reação em questão, a do *n*-decano, tem um $\Delta H_{reação} < 0$, ou seja, o resultado final entre calor de formação dos produtos com o de decomposição dos reagentes resulta na

liberação de energia. No entanto, algumas reações não são processadas apenas em um sentido, elas variam entre sentido direto e indireto, como a do n-decano, e também em sentido contrário. Essas reações são conhecidas como reações de equilíbrio químico e serão descritas no subitem 2.2.1.

2.1.3 Estequiometria de reação

Estequiometria de reação, assim como, os termos anteriormente mencionados representam um dos conceitos mais importantes no estudo das reações. Pois, é por meio desta relação matemática que se estabelece o controle mássico em um processo químico. Ou seja, tem-se controle do quanto de massa foi convertido em produtos e o quanto resta a ser convertido, bem como, a quantidade alimentada ao processo.

A base de cálculo utilizada na estequiometria das reações é a mesma aplicada pela Lei de Conservação de Energia, mas com enfoque material. Assim, massa não se perde, é convertida.

Tendo como foco as reações de combustão, podemos definir três tipos de reações quanto a estequiometria. As reações pobres, ricas ou estequiométricas. Para tanto, é necessário estabelecer um elemento de referência para esta comparação; assim, por convenção a combustão atribui ao agente oxidante à característica de limitante da estequiometria das reações.

Reações balanceadas têm proporção unitária entre as quantidades de mols do combustível e oxidante, ou seja, as quantidades molares destes reagentes são completamente convertidas em produtos durante a combustão. Já as reações desbalanceadas, têm quantidades em excesso (pobre) ou escassez (ricas) do oxidante, provocando a conversão incompleta dos reagentes em produtos de combustão.

Ao fixar o combustível igual à unidade molar (1 mol), à medida que se aumenta a concentração de oxidante, menor é a representatividade do combustível; assim a reação torna-se pobre. Pois, não há combustível suficiente para reagir com a grande quantidade de oxidante. O inverso, por dedução é válido. Diminuindo a quantidade de oxidante para valores menores do que a unidade molar, mais rica é a reação, pois o combustível estará em maior quantidade do que o oxidante.

Em ambos os casos, a eficiência final da combustão é afetada. Assim, por meio de estudos numéricos e experimentais verificou-se que para o adequado funcionamento dos motores endotérmicos, quando não atingido as proporções estequiométricas, então se deve evitar excesso superior a 20% e escassez superior a 30% em base molar do oxidante.

Matematicamente temos:

$$\phi = \frac{\text{massa de oxidante (ar)}}{\text{massa de combustível}} \quad (7)$$

Tabela 1: Relação de equivalência ar-combustível.

Relação de equivalência	Tipo de mistura
$\phi > 1$	Mistura rica
$\phi < 1$	Mistura pobre
$\phi = 1$	Mistura estequiométrica

Fonte: O autor (2017).

De acordo com o exposto no livro *Introdução à combustão: conceitos e aplicações* do autor Stephen R. Turns, também é usual representarmos a estequiometria da reação por meio da porcentagem de ar estequiométrico (Equação 8) e pelo percentual de excesso de ar (Equação 9).

$$\% \text{ estequiométrica} = \frac{100 \%}{\phi} \quad (8)$$

$$\% \text{ estequiométrica de ar} = \frac{1 - \phi}{\phi} \cdot 100\% \quad (9)$$

O exposto demonstra a grande importância de se mensurar com precisão as quantidades de combustível e oxidante em uma reação de combustão. Uma vez que, as frações molares das reações influem não apenas na quantidade de energia cedida ao sistema na forma de entalpia de reação, mas também na composição qualitativa de produtos sobressalentes ao fim da combustão.

Mais especificamente, para os motores de combustão interna a estequiometria da reação de combustão determina o tipo de gás confinado no cilindro de combustão após a etapa de escape (4º tempo) e também as características e quantidade dos gases emitidos à atmosfera.

2.2 Entropia

Assim como a entalpia, a entropia é uma das propriedades termodinâmicas mais importantes no estudo das transformações de fase de substâncias e compostos químicos, e, portanto, é de interesse ímpar para análise dos sistemas de combustão. Essa propriedade

identifica a ocorrência espontânea, ou não, das reações envolvidas em sistemas reacionais, além de quantificar a dissipação dos gradientes de pressão, velocidade, concentração e temperatura.

Por meio da segunda Lei da Termodinâmica (2ª lei), a qual descreve a entropia, verificamos características importantes para os sistemas térmicos, nos quais extração de calor resulta na geração de trabalho. Nestes sistemas, o balanço de entropia - Equação 6 - mostra que o princípio da irreversibilidade é inevitável e necessário para que se obtenha trabalho efetivo. Isto, pois a transformação química de uma espécie ou substância "X1" em outra (de propriedades distintas - "X2"), não se dá de forma espontânea quando a espécie "X1" encontra-se em equilíbrio.

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{i=1,n} \dot{m}_i - S_i + \frac{\dot{Q}}{T} + \dot{S}_{ger} \quad (10)$$

A partir desse conceito verificamos a irreversibilidade das reações de combustão nos motores de combustão interna quando há efetiva geração de trabalho. Consequentemente, também observamos que as reações de equilíbrio químico estabelecidas prioritariamente pelos gases residuais confinados no volume morto superior da câmara de combustão não geram e nem consomem energia total do sistema, ao passo que o deslocamento de equilíbrio é um processo infinitesimal.

Portanto,

$$\frac{dS_{residual}}{dt} = 0 \quad (11)$$

$$\frac{dW_{residual}}{dt} = 0 \quad (12)$$

2.2.1 Equilíbrio químico

O equilíbrio químico corresponde à área da termodinâmica que visa representar as características físico-químicas de sistemas reacionais, com foco nas quantidades materiais envolvidas. Assim, no estudo da combustão em motores endotérmicos este processo tem grande influência na composição da mistura intermediária e na composição dos gases de escape.

Desta forma, é importante entender que o equilíbrio químico é um fenômeno que se desenvolve em sistemas reacionais onde a máxima entropia dos componentes foi atingida. Ou seja, toda perturbação térmica ou mecânica de grande amplitude foi convertida em entropia do sistema.

Tal fato só é possível, quando os processos físico-químicos são analisados em regime

permanente; e considerando que pequenas variações de trabalho exercidas sobre este não são mais intensas ou duráveis do que o admitido pelas Equações 10 e 11.

Assim, as perturbações ao processo são rigorosamente dissipadas na manutenção da pressão, temperatura e concentração do sistema em equilíbrio.

Em termos formais, *Le Chatellier* enunciou:

Se um sistema em equilíbrio é perturbado por uma alteração na concentração, temperatura ou pressão de um dos componentes, o sistema deslocará a sua posição de equilíbrio de forma a contrabalancear o efeito da perturbação. [G.C. Azzellini, USP-Notas de aula, pg. 2].

Contudo, o equilíbrio químico não é necessariamente um processo constituído de duas ou três espécies químicas, este pode ser um sistema composto por uma única espécie em composição de fase (deslocamento direto e inverso - $\leftrightarrow$). Apesar deste conceito, o que interessa para a análise do deslocamento químico nos motores de combustão interna é a interação dos diferentes compostos produzidos pela combustão. Desta maneira, associando a primeira e segunda lei da termodinâmica a um volume de controle isolado, ou seja, sem trocas térmicas e mecânicas, teremos uns dos métodos que correlacionam às infinitas "i" espécies envolvidas no processo de equilíbrio químico (*KORETSKY, 2007*).

Primeira lei da termodinâmica:

$$dU_i = \delta Q + \delta W = \delta Q - PdV_i \quad (13)$$

Aplicando a definição de entalpia à equação 13, tem-se:

$$dH_i = \delta Q \quad (14)$$

Pela segunda lei da termodinâmica em regime permanente, pode-se escrever:

$$dS_i \geq \frac{\delta Q}{T} \quad (15)$$

Substituindo as equações 14 e 15 na equação 13, temos:

$$0 \geq dH_i - TdV_i \quad (16)$$

A equação 16 sem influências térmicas pode ser reescrita como:

$$0 \geq dH_i - TdS_i - S_i dT = d(H_i - TS_i) \quad (17)$$

Desta forma, por similitude verifica-se a existência de uma energia composta pela entalpia e entropia do sistema reacional, também conhecida como energia livre de Gibbs. A

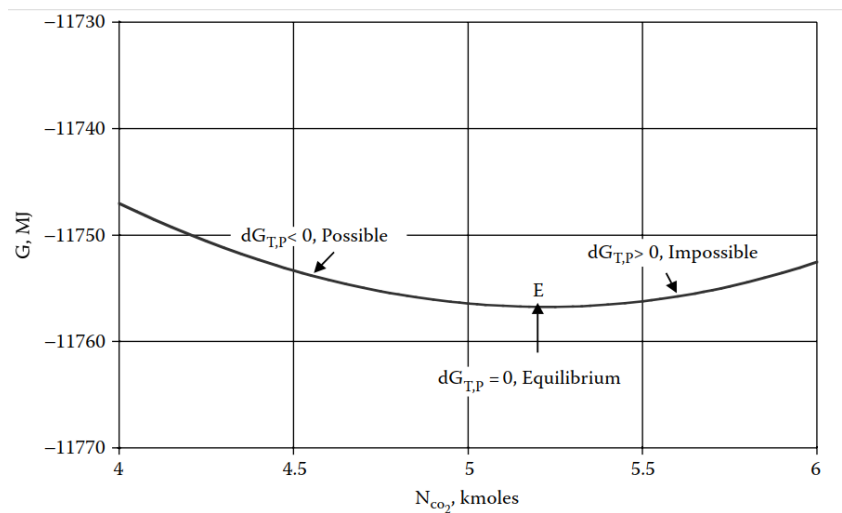
qual apresenta um valor de mínimo (Equação 19) para as reações em equilíbrio termodinâmico.

$$0 \geq G_i \approx H_i - TS_i \quad (18)$$

$$0 \geq (dG_i)_{T,P} \quad (19)$$

A visualização da energia livre de Gibbs e a existência de seu mínimo possibilitam quantificar a composição dos elementos de uma reação em equilíbrio, como exemplificado na Figura 5 para o equilíbrio do CO_2 .

Figura 5: Energia livre de Gibbs para o equilíbrio químico de CO_2 .



Fonte: ANNAMALAI e PURI (2005).

No caso deste trabalho, tal conceito permitirá prever quais os principais gases residuais estarão em equilíbrio dentro da câmara de combustão dos motores ICE. Uma vez que, o equilíbrio será assumido após o escape e antes do tempo da admissão. Período no qual o volume morto do cilindro atua como um volume de controle isolado, satisfazendo em parte o aqui discutido. No capítulo seguinte também será colocado o método de Lagrange, alternativa ao cálculo do equilíbrio químico, bem como suas vantagens sobre o método de minimização de energia de Gibbs.

2.3 Cinética química das reações

A cinética química, de forma simplificada, poder ser definida com o campo das ciências térmicas responsável pelo entendimento e avaliação das etapas de formação e decomposição de elementos químicos em função do tempo. Assim, as avaliações sobre a cinética das reações são extremamente dependentes dos conceitos fundamentais da termodinâmica

clássica e muitas vezes da termodinâmica estocástica. As velocidades das reações intermediárias de um processo estão acopladas a quantidade de calor absorvido (ou liberado) durante as etapas reacionais, sendo também estreitamente dependentes da probabilidade de colisões efetivas para que estas reações ocorram

Neste sentido, os conceitos de cinética química são fundamentais ao estudo térmico nos ciclos motores, seja para predizer o atraso químico das reações e aperfeiçoar o ponto de centelhamento nos motores ICE; ou para verificar condições de auto-ignição da mistura ar-combustível em regiões e instantes não desejáveis durante a combustão.

A velocidade de reação, usualmente determinada pela característica do processo mais lento, é resultado de um conjunto de reações intermediárias que somadas dão origem às conhecidas reações globais. A equação do n-decano exemplificada no item 2.1.2 é a expressão global para o conjunto de reações que se desenvolvem em série e em paralelo para este composto, e que ao fim do processo geram energia térmica e produtos residuais característicos desta reação.

Contudo, o processo de obtenção exato dos produtos da equação 5 não é simples, estes dependem de condições específicas de pressão, temperatura e concentração. Tal complexidade foi verificada por Ming Jia e Mao-zhao Xie e publicado no artigo "*A chemical kinetics model of iso-octane oxidation for HCCI engines*", no qual são apresentadas 69 equações intermediárias com 38 espécies envolvidas na combustão do iso-octano, como exemplificado na Tabela 2.

Tabela 2: Espécies envolvidas na combustão do iso-octano.

Ar	O_2	N_2	CO_2	H_2O
CO	H_2	OH	H_2O_2	HO_2
H	O	CH_3O	CH_2O	HCO
CH_2	CH_3	CH_4	C_2H_3	C_2H_4
C_2H_5	C_3H_4	C_3H_5	C_3H_6	C_3H_7
C_4H_8	C_8H_{18}	C_8H_{17}	C_8H_{16}	$C_8H_{17}OO$
$C_8H_{16}OOH$	$OOC_8H_{16}OOH$	$OC_8H_{15}OOH$	$OC_8H_{15}O$	N
N_2O	NO	NO_2		

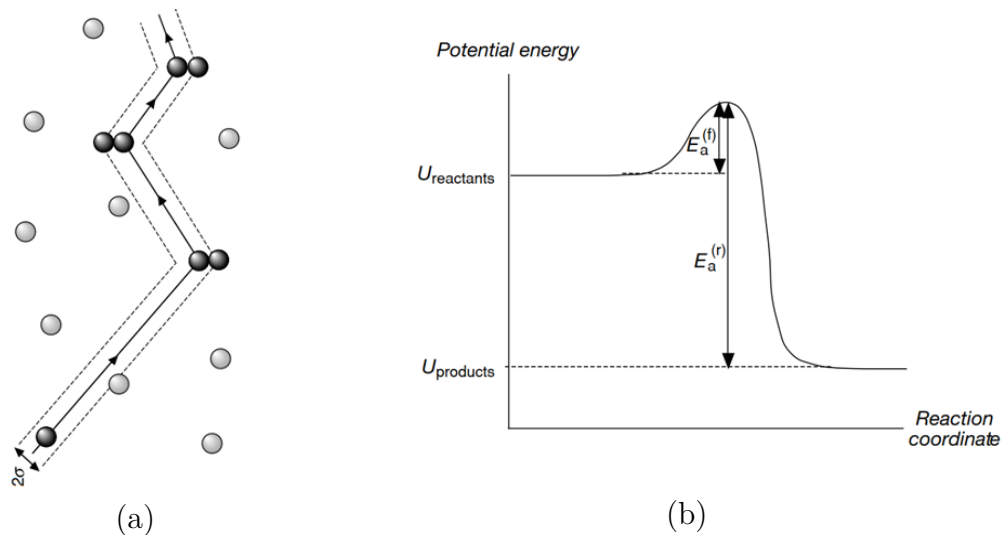
Fonte: Ming Jia e Mao-zhao Xie (2006).

No referido artigo, a expressão de Arrhenius (equação 20) é empregada na estimativa da constante de velocidade das reações intermediárias de modo a ser verificado o atraso químico global da combustão do iso-octano. Os resultados encontrados foram validados pela comparação de dados experimentais e apresentaram excelente proximidade com a realidade.

$$k_{\text{velocidade}} = A.T^b.exp\left(\frac{E_a}{R_u.T}\right) \quad (20)$$

Na constante de velocidade de Arrhenius, observam-se os termos pré-exponenciais (A , T e b) e exponenciais (E_a , R_u e T). O primeiro grupo é descrito pela literatura como o fator de frequência de colisões intermoleculares (Figura 6a), já ao segundo, conhecido como fator de Boltzmann corresponde à energia necessária para o rearranjo molecular durante a reação química, representado pelo Figura 6b.

Figura 6: (a) Colisões em uma reação química e (b) $U_{\text{potencial}}$ versus $E_{\text{ativação}}$.



Fonte: WARNATZ *et al*, v. 348, n. 1, (1997).

2.4 Ignição e Auto-Ignição

Por definição os processos de ignição (Figura 7a) e auto-ignição (Figura 7b) têm características muito semelhantes, no entanto, a forma como têm início é razoavelmente diferente. Assim, entender o contexto no qual esses dois fenômenos se desenvolvem é de suma importância no estudo global da combustão e das particularidades deste processo.

A literatura estabelece que a ignição trata-se de um processo que tem início pelo aumento pontual de temperatura da mistura ar-combustível, promovida por uma fonte ignitora (F.I) direcionada a este fim, ou seja, um elemento externo e apropriado, eleva a

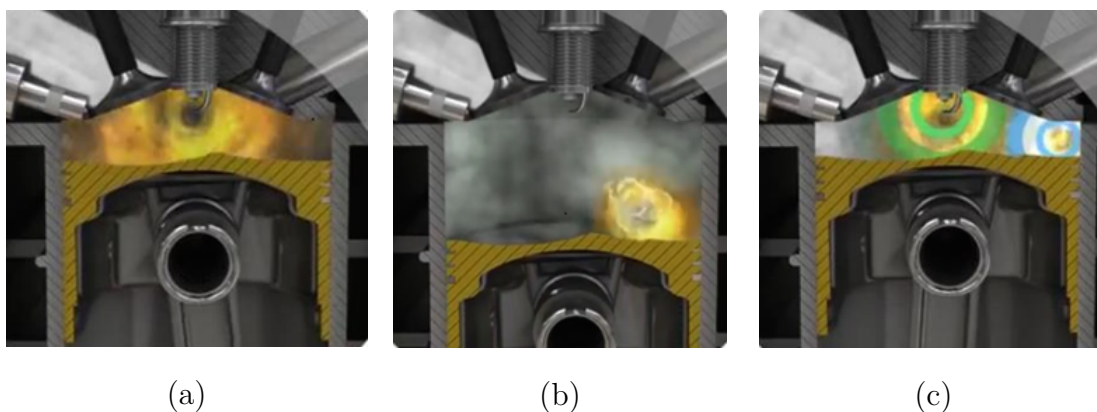
temperatura de um volume confinada de mistura explosiva, induzindo-a a liberar e propagar calor para suas vizinhanças em milésimos de segundos de forma a alimentar ou dar início ao processo de combustão. Neste conceito, verifica-se que a ignição da mistura explosiva é um subprocesso da combustão.

Entretanto, esta relação causal, não implica em uma relação consecutiva entre ignição e combustão. Para que a combustão se desenvolva é necessário que a ignição inicial de um determinado volume de mistura explosiva atinja um potencial mínimo de instabilidade energética, como exemplificado na Figura 6b. Atingindo este patamar, a reação possui condições mínimas de iniciar, mas talvez, não possua condições mínimas de se estabelecer. Assim, a energia de ativação mínima cria condições para que uma quantidade de reagente seja convertida em produtos, mas não garante que esses produtos terão energia térmica suficiente para a indução térmica dos reagentes circundantes.

Da mesma forma a auto-ignição é processada, mas com a importante diferença de que agora a fonte de ignição não tem a função específica de fornecer energia térmica ao processo.

Em motores ICE a ignição ocorre através das centelhas produzido pelas velas de ignição, já a auto-ignição recebe energia térmica das paredes da câmara de combustão e, indiretamente, do processo de aumento da pressão durante o tempo motor de compressão. Neste estágio, a mistura explosiva tem uma grande redução de volume, seguida do aumento progressivo de pressão; fatores que provocam o aumento da temperatura no interior da câmara de combustão e possíveis ocorrências da auto-ignição. Para este caso, o qual a ignição ocorre durante a compressão, também damos o nome de detonação da mistura ou *knock* (Figura 7c).

Figura 7: (a) Combustão normal, (b) auto-ignição e (c) detonação.



Fonte: <http://bestcars.uol.com.br/>, (Acesso em 17 de setembro de 2017).

3 METODOLOGIA MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

Nesta seção serão apresentados os modelos e sub-modelos utilizados na simulação do motor de quatros tempos do ciclo Otto. Desta forma, o estudo das propriedades geométricas do referido motor serão expostas juntamente com uma breve análise de sua importância ao ciclo. Também serão apresentadas as metodologias de cinética química das reações utilizadas no modelo de liberação de energia na queima do iso-octano. As equações de equilíbrio químico dos gases residuais terão destaque nesta seção, uma vez que, o atraso químico das reações de combustão também está ligado à quantidade molar das espécies residuais na câmara de combustão.

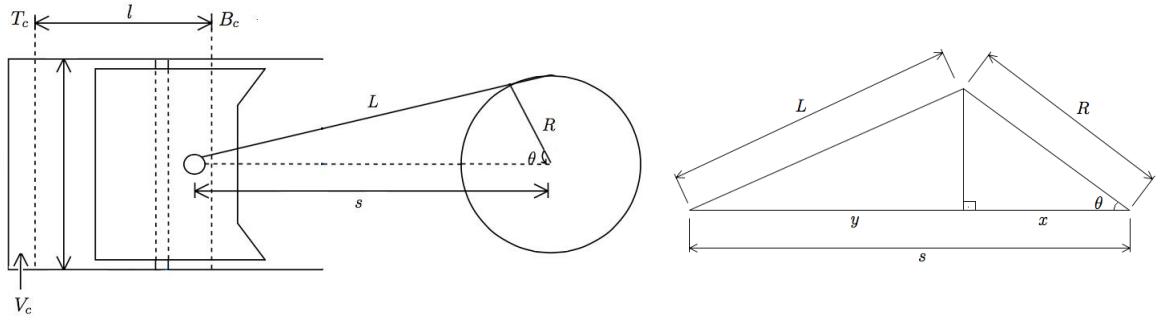
3.1 Geometria do Motor ICE

O estudo da geometria do motor de combustão interna é fator determinante para a compreensão do funcionamento deste sistema, no entanto, as equações aqui apresentadas terão como única finalidade estabelecer relações numéricas entre o volume da câmara de combustão (V_{cc}) com o ângulo do eixo virabrequim (θ). Consequentemente, também serão expostos fatores geométricos de operação das válvulas de admissão e escape, de modo que, a variação angular do eixo virabrequim provoque alterações no volume de mistura ar-combustível admitida; promovendo alterações de temperatura, pressão e massa no interior do cilindro de combustão.

3.1.1 Avaliação geométrica quanto ao volume

Demonstração das equações para o volume da câmara de combustão utilizadas no simulador.

Figura 8: Relação geométrica do pistão.



Fonte: LIBERMAN (2010).

Por meio da análise trigonométrica formada pelo comprimento da biela “L” e do raio do eixo virabrequim “R”, então podemos escrever:

$$x = R \cdot \cos \theta \quad (21)$$

$$L^2 = y^2 + (R \cdot \sin \theta)^2 \quad (22)$$

$$y = \sqrt{L^2 - (R \cdot \sin \theta)^2} \quad (23)$$

$$s = x + y \quad (24)$$

$$s = R \cdot \cos \theta + \sqrt{L^2 - (R \cdot \sin \theta)^2} \quad (25)$$

Considerando “s” o percurso efetivo realizado pelo pistão, V_c o volume morto e o volume total do cilindro sendo $V_{cc} + V_c$, então o volume total de trabalho pode ser escrito como:

$$V = V_{cc} + \frac{\pi \cdot D^2}{4} \cdot (L + R - S) \quad (26)$$

$\epsilon = \frac{V_{PMI}}{V_{PMS}}$, taxa de compressão.

$$V = V_{cc} \left[1 + \frac{1}{2}(\epsilon - 1) \left(\frac{L}{R} + 1 - \cos \theta - \sqrt{\left(\frac{L}{R} \right)^2 - \sin^2 \theta} \right) \right] \quad (27)$$

Adicionalmente ao cálculo do volume total (Equação 26), devemos também acrescentar uma variável que controle as mudanças volumétricas dentro do cilindro instante a instante. Assim, é necessário derivar a equação do volume total em função do ângulo teta, pois desta forma será admitido nos cálculos que a variação infinitesimal ($dV/d\theta$) representa uma parcela instantânea das mudanças ocorridas no sistema de controle, caracterizado pelo cilindro de combustão.

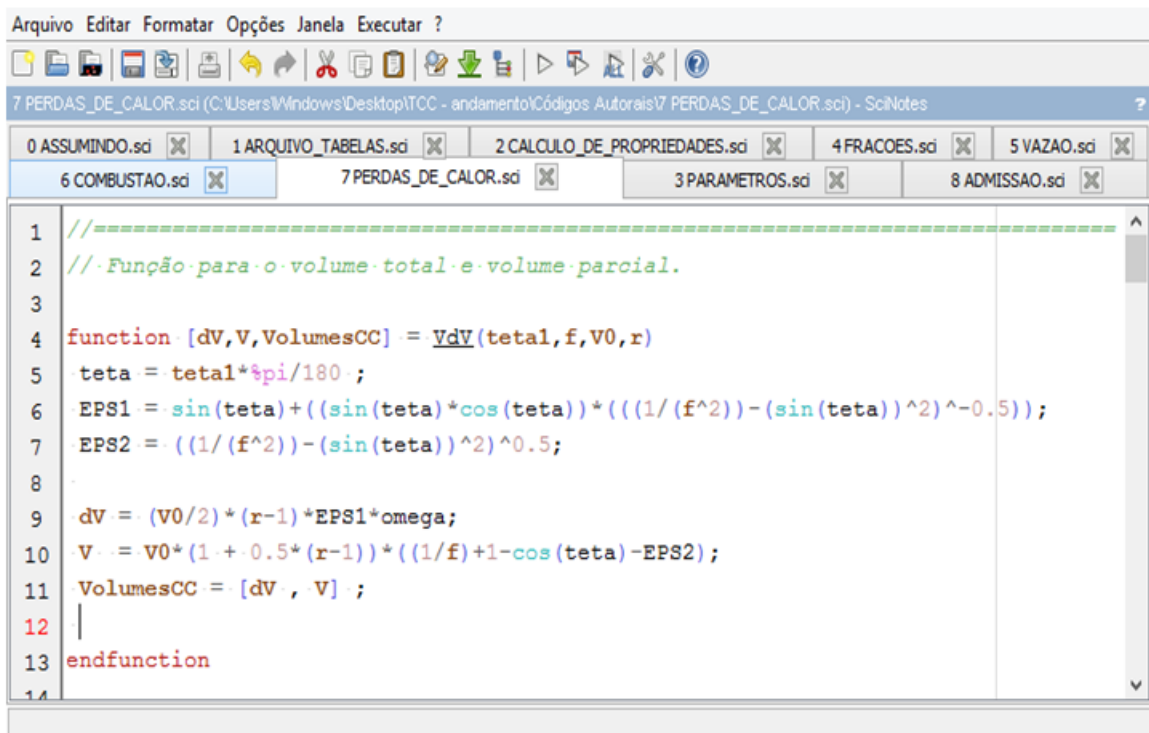
Neste sentido teremos:

$$\frac{dV}{d\theta} = \frac{V_{cc}}{2} (\epsilon - 1) \sin\theta + \left\{ (\sin\theta \cos\theta) \left[\left(\frac{1}{(R \div L)^2} - \sin^2\theta \right) - 0.5 \right] \right\} \omega \quad (28)$$

Feito o desenvolvimento matemático para o volume e sua componente instantânea, então, basta transcrever as equações para linguagem de programação desejada.

A seguir, está exposta a função criada para o controle de V e ($dV/d\theta$) no simulador da combustão para o ciclo Otto.

Figura 9: Função em Scilab para o cálculo do volume total.



```

1 //=====
2 // Função para o volume total e volume parcial.
3
4 function [dV,V,VolumesCC] = VdV(tetal,f,V0,r)
5 teta = tetal*pi/180 ;
6 EPS1 = -sin(teta) + ((sin(teta)*cos(teta))*((1/(f^2)) - (sin(teta))^2)^-0.5));
7 EPS2 = ((1/(f^2)) - (sin(teta))^2)^0.5;
8
9 dV = (V0/2)*(r-1)*EPS1*omega;
10 V = V0*(1+0.5*(r-1))*((1/f)+1-cos(teta)-EPS2);
11 VolumesCC = [dV , V] ;
12
13 endfunction
14

```

Fonte: O autor (2017).

Esta função, como já mencionado, tem grande importância na simulação do ciclo em análise. Isto, pois a cada variação angular do eixo virabrequim o volume dentro da câmara

de combustão tem um incremento ou decréscimo do volume de trabalho ocasionando perdas térmicas, variações de pressão e temperatura. A Equação 29, dos gases ideais, com auxílio da Tabela 3 ilustra de forma sucinta a dependência do volume sobre as variáveis de interesse para o ciclo.

$$P.V = n.R.T \quad (29)$$

Tabela 3: Relação de proporcionalidade da equação dos gases ideais para dois casos.

	Pressão (P[bar])	Volume (V [m^3])	Número de mols (n [mols])	Constante universal dos gases (R [$\frac{J}{kg.K}$]).	Temperatura (T [K])
Caso 1	↓	↑	cst	cst	Nada se pode inferir
Caso 2	↑	↓	cst	cst	↑

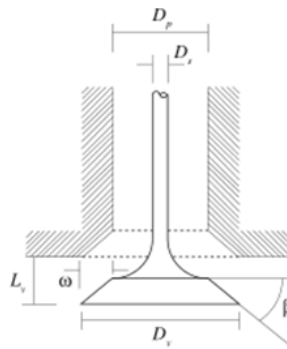
Fonte: O autor (2017).

3.1.2 Avaliação da área de abertura/fechamento das válvulas

A avaliação da área efetiva de abertura ou fechamento das válvulas de admissão e escape é de suma importância para o controle do volume total e diferencial das misturas dentro da câmara de combustão. Assim, a geometria destas válvula se o movimento desenvolvido por elas durante abertura e fechamento são determinantes para o controle exato das quantidades mássicas de gás fresco e residual que são succionados, confinados ou liberados no ciclo motor.

Desta forma, adotando para o conjunto de válvulas a geometria da Figura 10.

Figura 10: Configuração geométrica das válvulas de admissão e escape.



Fonte: LIBERMAN (2010).

O fluxo de mistura ar-combustível ou de gases queimados passando pelos pórnicos de admissão e escape torna-se função do levantamento máximo ($L_{v,max}$) que as válvulas podem desenvolver, permitindo mudanças de fluxo a cada levantamento instantâneo (L_v). Neste sentido, é necessário calcular a área instantânea (A_T) disponível para o escoamento das misturas durante o 1º e 4º tempo motor. Desta forma, as equações 30, 31, 32, 33, 34 e 35 foram adotadas para o controle das (A_T), por meio de uma série de restrições pré-ajustadas a geometria do sistema.

Então, se o conjunto geométrico da válvula se adequar a Equação 30.

$$0 < L_v < \left(\frac{w}{\sin\theta \cdot \cos\theta} \right) \quad (30)$$

A área instantânea disponível ao escoamento de determina mistura será:

$$A_T = \pi \cdot L_v \cdot \cos\theta \cdot \left[D_v - 2 \cdot w + \frac{L_v}{2} \cdot \sin(2\theta) \right] \quad (31)$$

Da mesma forma é feito para o conjunto de equações 32 $\mapsto$ 33 e 34 $\mapsto$ 35.

$$\left[\left(\frac{D_p^2 - D_s^2}{4 \cdot D_m} \right) - w^2 \right]^{\frac{1}{2}} + w \cdot \tan \beta \geq L_v > \left(\frac{w}{\sin\beta \cdot \cos\beta} \right) \quad (32)$$

$$A_T = \pi \cdot (D_v - w) \cdot \sqrt{(L_v - w \cdot \tan \beta)^2 - w^2} \quad (33)$$

$$L_v \geq \left[\left(\frac{D_p^2 - D_s^2}{4 \cdot D_m} \right) - w^2 \right]^{\frac{1}{2}} + w \cdot \tan\beta \quad (34)$$

$$A_T = \frac{\pi}{4} \cdot (D_p^2 - D_s^2) \quad (35)$$

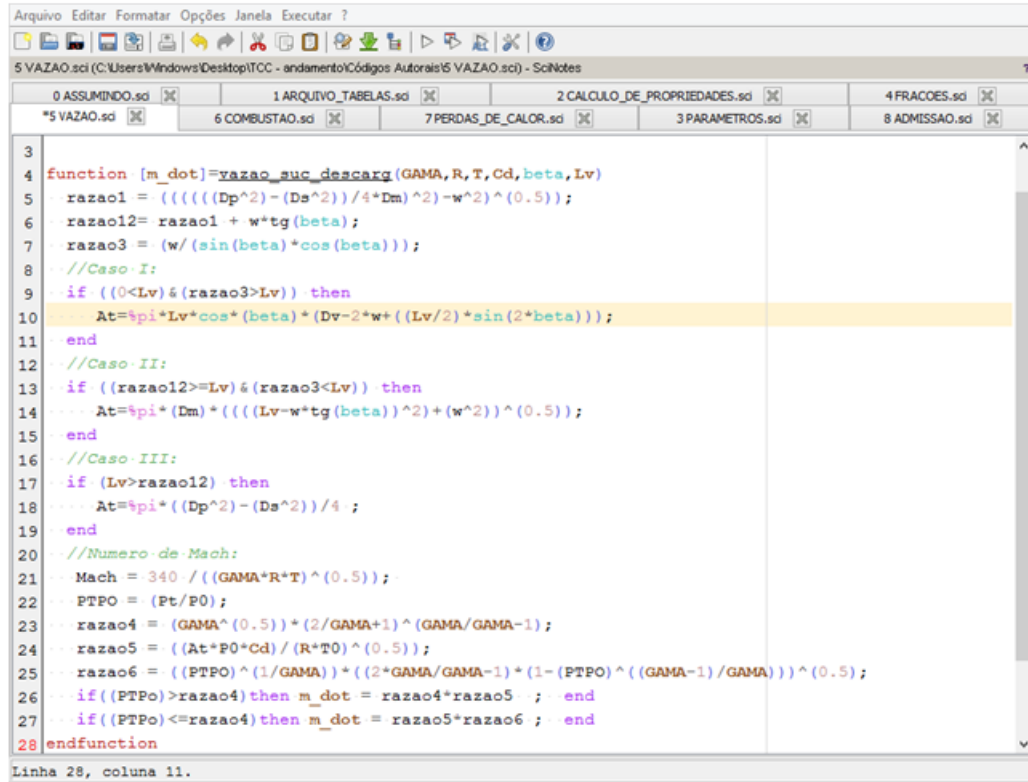
A Equação 36 (levantamento instantâneo) foi utilizada como objeto comparativo para a verificação das condições geradas pelas equações 30, 32 e 34.

$$L_v = L_{max} \cdot \sin^2 \left[\left(\frac{\phi - \phi_{abre}}{\phi_{fecha} - \phi_{abre}} \right) \cdot \pi \right] \quad (36)$$

A seguir é apresentado o código computacional com as equações descritas neste item. Também é possível verificar pela Figura 10 uma série de expressões auxiliares não apresentadas algebricamente neste tópico. Tais omissões foram realizadas, tendo em vista que estas

são variáveis de referência, ou seja, são fatores de correção para as pressões e temperaturas locais, as quais variam de acordo com a altitude em relação ao nível do mar.

Figura 11: Sistema de equações para a abertura e fechamento das válvulas.



```

3
4 function [m_dot]=vazao_suc_descarg(GAMA,R,T,Cd,beta,Lv)
5   razao1 = (((((Dp^2)-(Ds^2))/4*Dm)^2)-w^2)^(0.5);
6   razao12= razao1 + w*tg(beta);
7   razao3 = (w/(sin(beta)*cos(beta)));
8   //Caso I:
9   if ((0<Lv) & (razao3>Lv)) then
10    At=pi*Lv*cos(beta)*(Dv-2*w+((Lv/2)*sin(2*beta)));
11  end
12  //Caso II:
13  if ((razao12>=Lv) & (razao3<Lv)) then
14    At=pi*(Dm)*(((Lv-w*tg(beta))^2)+(w^2))^(0.5);
15  end
16  //Caso III:
17  if (Lv>razao12) then
18    At=pi*((Dp^2)-(Ds^2))/4;
19  end
20  //Numero de Mach:
21  Mach = 340 / ((GAMA*R*T)^(0.5));
22  PTPO = (Pt/P0);
23  razao4 = (GAMA^(0.5))*((2/GAMA+1)^(GAMA/GAMA-1));
24  razao5 = ((At*P0*Cd)/(R*T0)^(0.5));
25  razao6 = ((PTPO)^(1/GAMA))*((2*GAMA/GAMA-1)*(1-(PTPO)^((GAMA-1)/GAMA)))^(0.5);
26  if ((PTPO)>razao4) then m_dot = razao4*razao5; end
27  if ((PTPO)<=razao4) then m_dot = razao5*razao6; end
28 endfunction

```

Linha 28, coluna 11.

Fonte: O autor (2017).

3.2 Modelos Computacionais para a Combustão

A combustão por se tratar de um processo complexo com diversos níveis de dependência e simultaneidade torna-se um fenômeno inviável de ser modelado e simulado em plenitude; seja pelas dificuldades matemáticas envolvidas no processo algébrico ou pela demanda computacional impraticáveis para a atualidade.

Heywood em seu livro *Análise de Motores de Combustão Interna* (1988), afirmou que a combustão não se trata apenas de um processo em separado, mas de um conjunto de processo interconectados dos quais pouco se entende. Enfatizando, os processos químicos tais como: cinética química e deslocamento químico.

Neste sentido, esta subseção irá apresentar de maneira simplificada o modelo matemático da combustão quasi-dimensional de modo a explicitar o que de mais relevante este modelo apresenta.

3.2.1 Modelo quasi-dimensional

O modelo quasi-dimensional foi utilizado neste trabalho, visando os submodelos de mistura e propagação de chama. Características que teoricamente aumentam a precisão dos resultados obtidos para a potência e o torque do ciclo motor.

A presença da turbulência em escalas de menor magnitude, próximas a da dissipação energética turbulenta proposta por Kolmogorov (1942), são as escalas que definem a propagação da chama em direção à mistura ar-combustível não queimado. Assim, são apresentadas as equações do modelo quasi-dimensional onde:

S_T : Velocidade turbulenta de chama.

$\dot{m}_{nq}$: Vazão mássica de mistura não queimada.

A_f : Área média de frente de chama não queimada.

ρ_{nq} : Densidade dos gases não queimados.

A Equação 37 representa o fator de proporcionalidade de propagação turbulenta, estimado por Heywood, o qual utiliza da rotação [rpm] do motor para o cálculo.

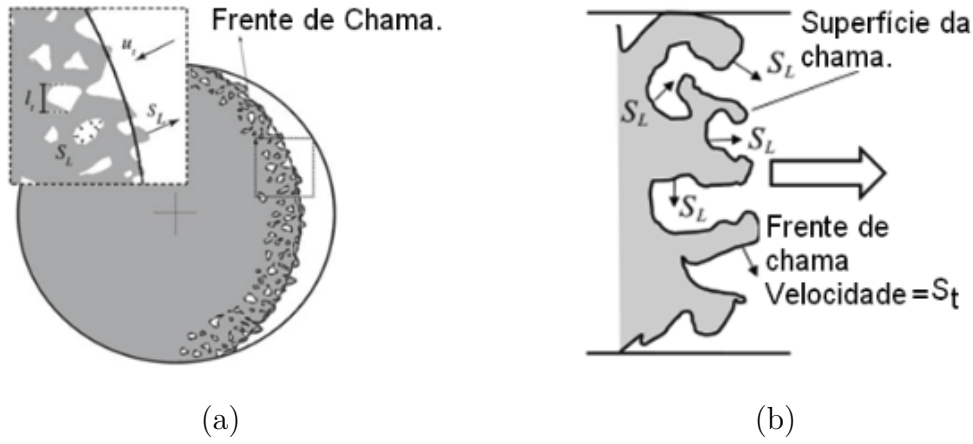
$$f = 1 + 0,0018.N \quad (37)$$

Utilizando o fator de proporcionalidade e os valores das frações mássicas de produtos queimados, a equação 38 possibilita o conhecimento da velocidade de propagação da frente de chama turbulenta em sentido da mistura não queimada de ar-combustível.

$$S_T = f \cdot S + L \cdot \frac{\frac{\rho_{nq}}{\rho_q}}{\left(\frac{\rho_{nq}}{\rho_q} - 1\right) \cdot x_q + 1} \quad (38)$$

Tomando, ainda como referência a Equação 38 e utilizando as Figuras 12a e 12b vemos que os comprimentos l_t não queimados são englobados pela frente de chama produzindo combustões localizadas e realimentando o processo. Contudo, quando a propagação da frente de chama é intensa a turbulência suprime as combustões localizadas e extingue o processo. Por esta razão o fator de proporcionalidade torna-se importante, pois verifica o grau de perturbação do sistema e estima as condições ideais da propagação da chama laminar.

Figura 12: (a) Comprimento característico não queimado e (b) frente de chama.



Fonte: Marco Chiodi (2011), **alterada**.

Apesar da relevância, a propagação da chama laminar e turbulenta, não apresenta aplicabilidade direta ao código computacional produzido neste trabalho. Contudo, a vazão de fluido explosivo que perpassa a frente de chama é de grande interesse, pois é por meio desta vazão que os cálculos de conversão de reagentes em produtos vão ser processados à medida que o eixo de manivela gira durante o tempo motor da combustão.

$$\dot{m}_{dentro\ da\ chama} = A_f \cdot \rho_{nq} \cdot S_L \quad (39)$$

Assim, a equação 29 torna-se o foco dos cálculos desta seção e tem como auxiliares as equações a seguir.

$$S_{Lo} = 0,0458 \cdot \phi^{-0,226} \cdot \exp[-4,48 \cdot (\phi - 1,075)^2] \quad (40)$$

$$S_L = S_{Lo} \cdot \left(\frac{T_{nq}}{T_{ref}} \right)^\alpha \cdot \left(\frac{P}{P_{ref}} \right)^\beta \cdot (1 - 2,06 y_r^{0,077}) \quad (41)$$

$$l_t = 0,8_{Lv,max} \cdot \left(\frac{\rho_i}{\rho_{nq}} \right)^{\frac{3}{4}} \quad (42)$$

3.2.2 Modelo para o atraso químico da combustão

A cinética química das reações de combustão, como discutidas no capítulo anterior, é um conjunto de reações paralelas e/ou concorrentes que determinam a liberação de energia efetiva durante a combustão e consequentemente a velocidade com que esta é liberada ao sistema de interesse.

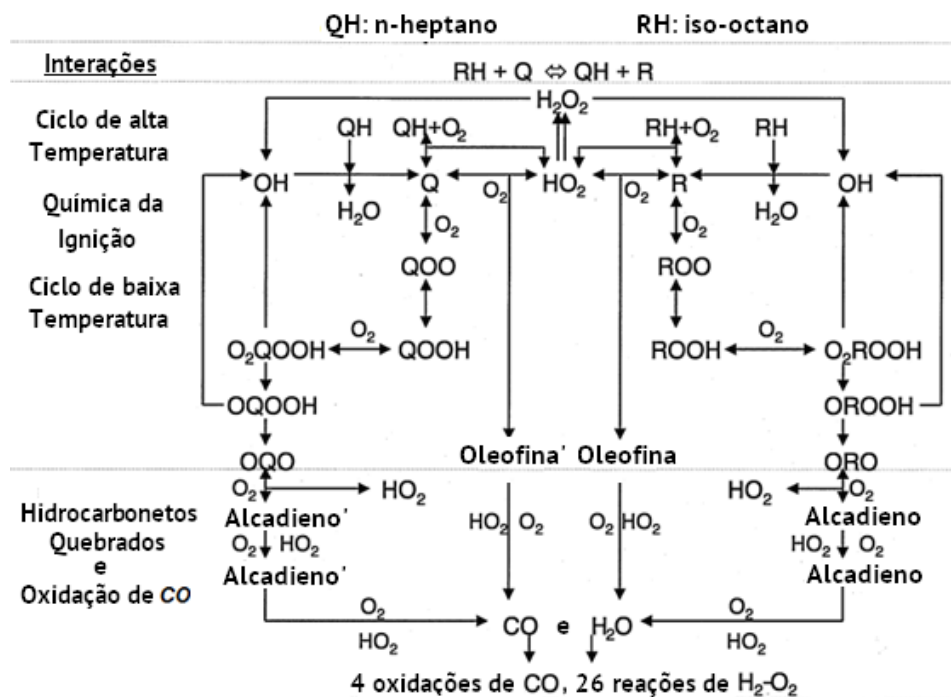
Assim neste trabalho, o atraso químico das reações do iso-octano em motores ICE foi avaliado sob duas perspectivas que se complementam para a otimização e modelagem computacional do problema estudado.

Sendo estas:

1. Síntese dos mecanismos de reação.
2. Atraso de ignição pré-modelado em etapa única.

Para o primeiro caso, foi realizado um estudo dos caminhos prioritários da reação de combustão do iso-octano, de acordo com a Figura 13.

Figura 13: Caminhos prioritários para a reação de queima do iso-octano.

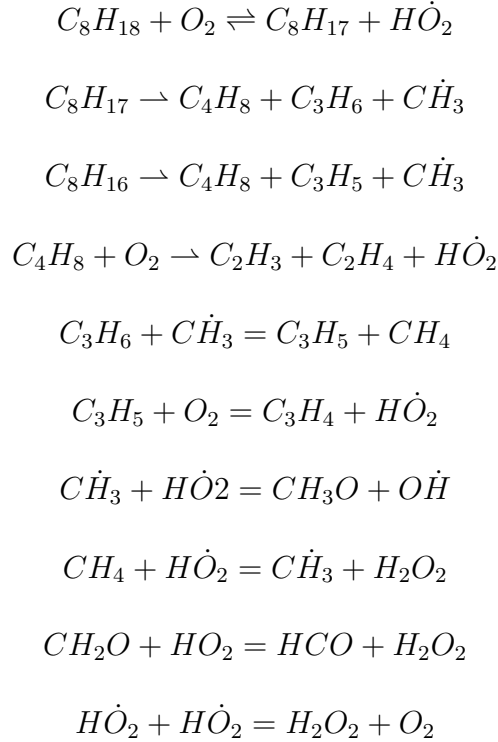


Fonte: LIBERMAN (2010), alterada.

Nesta avaliação foi adotado como critério de seleção a presença de radicais livres, a interdependência das reações e também a energia de ativação (E_a) exigida por cada uma das reações envolvida na combustão do iso-octano; ou seja, qualquer reação dentre as descritas por Mao-zhao e Xie que apresentasse alto valor de E_a foi inicialmente considerada

como uma possível reação prioritária. No entanto, algumas das reações com altos valores de energia de ativação, ou não apresentavam radicais livres ou não apresentavam composto necessário às reações sub-sequentes.

Por meio destas avaliações foi possível extrair da literatura o seguinte conjunto de reações, as quais foram consideradas como as prováveis responsáveis pelo o atraso químico da combustão do iso-octano.



Partindo do conjunto de reações obtidas do caso 1, anteriormente mencionada, foi possível inferir que o oxigênio em ligação química estável ou na forma instável de radical era um dos fatores determinante para a velocidade das reações de combustão. Assim, ficou estabelecido que o atraso de ignição pré-modelado (caso 2) deveria apresentar uma equação em etapa única que levasse a fração molar de oxigênio em consideração para o cálculo final do atraso químico da combustão.

Desta forma, foi adotando à equação de X. He *et al*, 2005.

$$\tau_{ign} = 1,3 \cdot 10^{-4} \cdot P^{-1,05} \cdot x_{oxig}^{-1,41} \cdot \exp(33700 \cdot R^{-1} \cdot T) \quad (43)$$

Na Equação 43, usada para modelar o atraso químico da combustão, fica evidente a participação efetiva da pressão e da relação de equivalência (ϕ), no entanto pela maior representatividade do expoente da fração mássica de oxigênio fica claro a importância dada a esse termo na determinação do atraso químico das reações de combustão do iso-octano na análise de etapa única.

3.2.3 Modelo para o deslocamento de equilíbrio químico

O equilíbrio químico, bem como o atraso químico da combustão, são modelos quantitativos ligados à produção e ao consumo de espécies químicas durante as diversas reações de oxidação da mistura comburentes em sistemas motores.

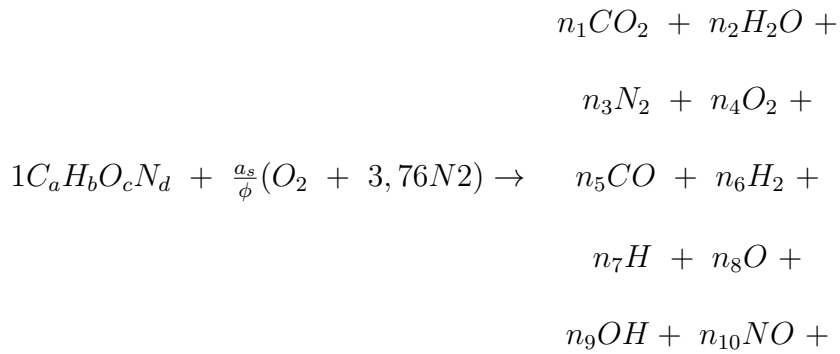
Apesar desta similaridade entre os modelos, o deslocamento químico, tem como principal atribuição o controle mássico ou molar dos compostos gerados ou consumidos sem a influência do tempo.

Neste sentido, a determinação das frações molares presentes no sistema combustor é fundamental para o entendimento e predição de variáveis térmicas e de potência, isto, pois concentrações sobressalentes de combustível e oxigênio tem grande influência sobre o atraso da combustão dos ciclos seguintes como pode ser verificado pela Equação 43.

Como expresso na Figura 5 (equilíbrio do CO_2), vemos que o equilíbrio de uma reação ou conjunto de reações ocorre quando a energia livre de Gibbs atinge ponto de mínimo em relação ao consumo ou a produção de compostos químicos.

Desta forma, do ponto de vista teórico seria prudente calcular as constantes de equilíbrio com base na energia livre de Gibbs, contudo, tal método adiciona variáveis extras ao processo tornando-o inviável neste trabalho. Por esse motivo, o equilíbrio químico será calculado utilizando o método de Lagrange, o qual se trata de uma relação matricial entre a equação geral da combustão e as constantes de equilíbrio das reações de interesse.

Assim, temos a equação geral da combustão:



O balanço das quantidades de carbono (C) :

$$a = (y_1 + y_2) \quad (44)$$

O balanço das quantidades de hidrogênio (H) :

$$b = (2y_2 + 2y_6 + y_7 + y_9) \quad (45)$$

O balanço das quantidades de oxigênio (O) :

$$c + 2\frac{a_s}{\phi} = (2y_1 + y_2 + 2y_4 + y_5 + y_8 + y_9 + y_{10}) \quad (46)$$

O balanço das quantidades de nitrogênio (N) :

$$d + 7,52\frac{a_s}{\phi} = (2y_3 + y_{10}) \quad (47)$$

Onde y_i representa a fração molar da espécie "i" em relação à quantidade molar do sistema, a qual é representada pela Equação 48.

$$\sum_{i=1}^{10} y_i = 1 \quad (48)$$

Contudo, apenas as equações de balanço não são suficientes para a solução do sistema de Equações 44 a 48, para tanto, necessitamos das equações de equilíbrio químico a seguir:

Tabela 4: Reações de equilíbrio químico e suas constantes.

Reação de Equilíbrio	Constante de Equilíbrio
$\frac{1}{2}H_2 \rightleftharpoons H$	$K_1 = \frac{y_7 P^{0,5}}{y_6^{0,5}}$
$\frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons O$	$K_2 = \frac{y_8 P^{0,5}}{y_4^{0,5}}$
$\frac{1}{2}H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons OH$	$K_3 = \frac{y_9}{y_4^{0,5} y_6^{0,5}}$
$\frac{1}{2}O_2 + \frac{1}{2}N_2 \rightleftharpoons NO$	$K_4 = \frac{y_{10}}{y_4^{0,5} y_5^{0,5}}$
$\frac{1}{2}H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons H_2O$	$K_5 = \frac{y_2}{y_4^{0,5} y_6^{0,5}}$
$\frac{1}{2}CO + \frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons CO_2$	$K_6 = \frac{y_1}{y_4^{0,5} y_6^{0,5}}$

Fonte: Ferguson (2017), **alterada**.

Por meio destas equações de equilíbrio, e correlacionando-as às equações de balanceamento por elemento químico, serão geradas 11 equações e 11 incógnitas, as quais serão resolvidas pelo método numérico de fatoração LU (Lower and Upper).

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesta seção serão apresentados os resultados das simulações computacionais para um motor de quatro tempos do ciclo Otto operando com gasolina (iso-octano) em regime pleno.

Inicialmente serão apresentados os parâmetros mais relevantes quanto à geometria e operação do motor utilizado nas simulações computacionais, consecutivamente serão expostos os gráficos de pressão em função ângulo do virabrequim para três situações distintas de combustão.

Em seguida será apresentada a curva de rendimento em função do ângulo de combustão, de modo a confirmar a importância e eficácia deste trabalho para o entendimento e otimização do ponto de ignição da combustão. Finalmente, na última seção dos resultados, serão estabelecidas as frações molares dos gases residuais da combustão.

4.1 Parâmetros de Simulação

Os parâmetros de simulação utilizados neste trabalho foram inicialmente obtidos e comparados com dados extraídos da literatura. A dissertação de mestrado intitulada “*SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UM MODELO SIMPLIFICADO DE UM MOTOR À COMBUSTÃO INTERNA A GÁS NATURAL*” (BERTOLDI, 2007) foi utilizada para a inicialização dos parâmetros da Tabela 5, segunda coluna.

Já os argumentos da terceira coluna da Tabela 5, representam os valores otimizados da geometria e também do regime de funcionamento do motor ICE movido a gasolina, os quais sofreram adaptações no decorrer das simulações computacionais, de modo a considerar o atraso químico da combustão, as possíveis detonações do combustível e a auto-ignição da mistura comburente.

Tabela 5: Parâmetros de simulação.

Parâmetros	Valores Iniciais	Valores Otimizados	Unidades
Número de cilindros	1	1	[—]
Diâmetro do cilindro	79,5	101,6	[mm]
Comprimento da biela	129,03	147,6	[mm]
Diâmetro de ambas as válvulas	30	35,41	[mm]
Abertura máxima para ambas as válvulas	10	7,6	[mm]
Razão de compressão	10:1	9:1	[—]
Ângulo de abertura da válvula de admissão	0	0	[°]
Ângulo de fechamento da válvula de admissão	224	180	[°]
Ângulo de abertura da válvula de descarga	496	540	[°]
Ângulo de fechamento da válvula de descarga	720	720	[°]
Pressão de admissão	101,32	101,32	[kPa]
Temperatura de admissão	298	298	[K]
Pressão de exaustão	102,12	102,12	[kPa]

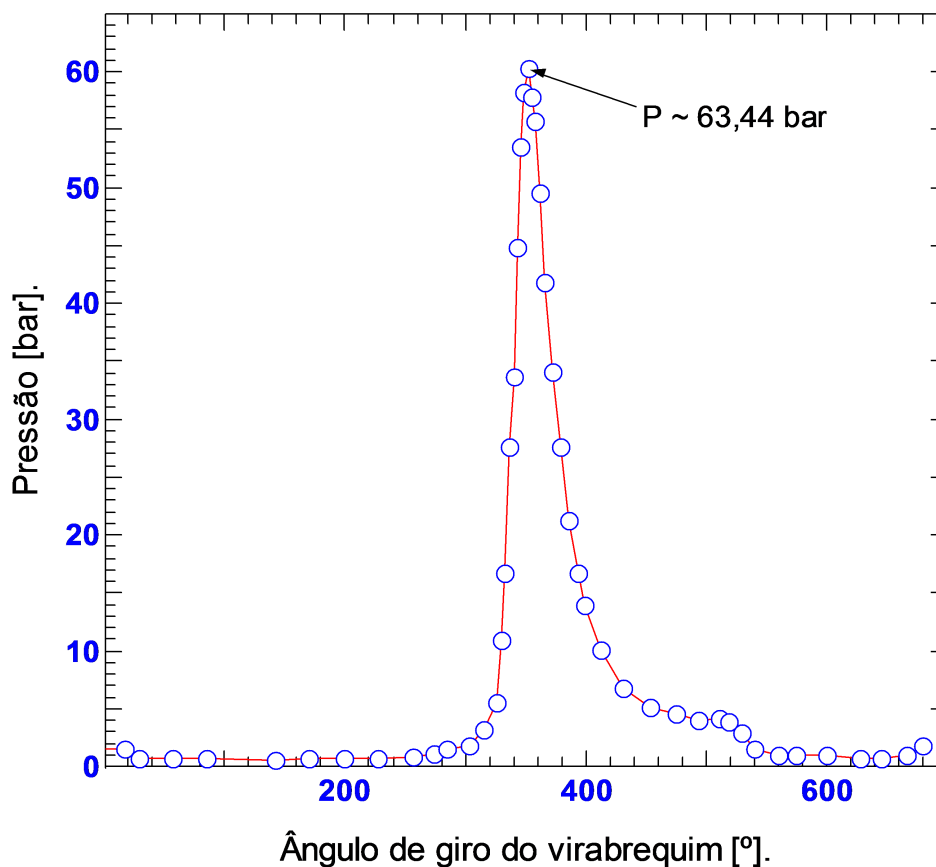
Fonte: O autor (2017).

4.2 Curvas de Potência e Rendimento

A obtenção das curvas de potência e rendimento ótimo para a combustão do iso-octano deu-se após intenso estudo e análise das equações cinéticas deste combustível. Também foram utilizados trechos do algoritmo computacional desenvolvido por GUIMARÃES, A.S. na dissertação de mestrado intitulada “*UM ALGORITMO PARA SIMPLIFICAR SISTEMAS DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS QUE DESCREVEM A CINÉTICA DE REAÇÕES QUÍMICAS*”, 2016.

Por meio destes métodos, curvas de pressão em função do ângulo de giro do virabrequim foram geradas e demonstraram que a ignição ideal para os parâmetros iniciais (Tabela 5, coluna 2) deveria ocorrer com avanço de 22° em relação ao ponto teórico de combustão, Figura 14.

Figura 14: Pressão *versus* ângulo de giro.



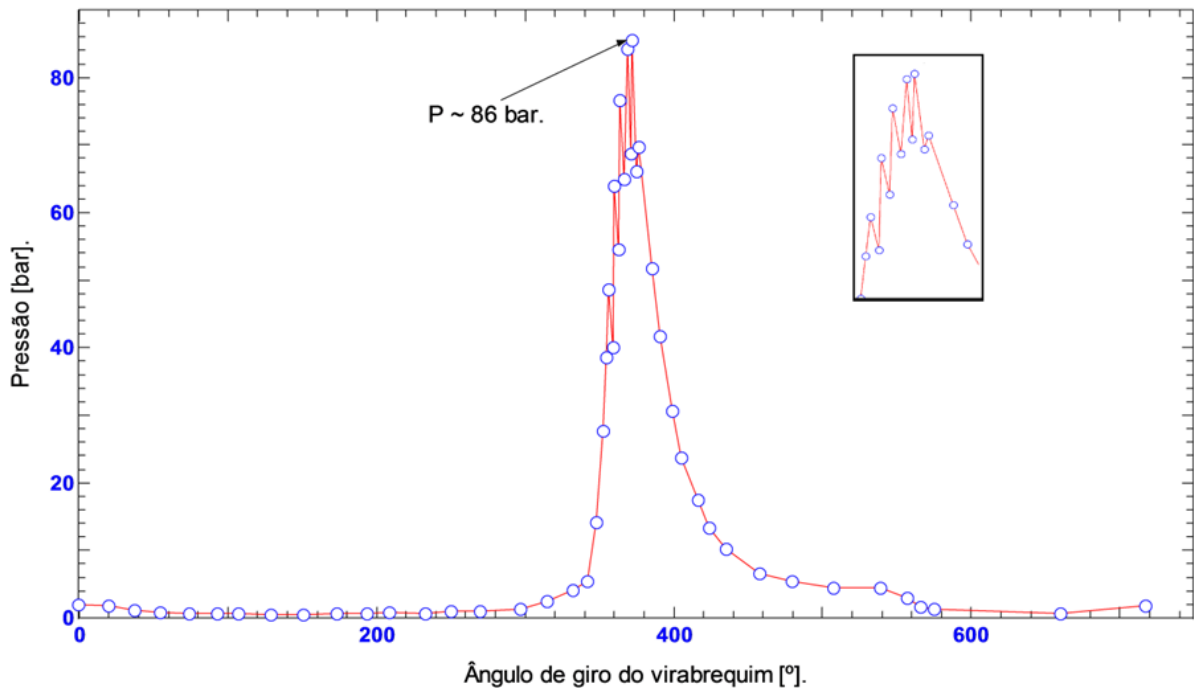
Fonte: O autor (2017).

Contudo, o valor de pressão alcançado assemelhou-se aos descritos na literatura, obtidos por modelos computacionais zero-dimensionais e também por métodos de tentativa e erro. Assim, o algoritmo construído foi remodelado de modo a fornecer o limite superior para a “ignição correta” da mistura combustível, bem como para realimentar as relações

paramétricas da Tabela 5.

Desta forma, foi possível alcançar a pressão limite de 69,94 bar com o mesmo avanço de ignição da Figura 14. Valores de pressão superiores ao anterior foram obtidos com pequenas variações paramétricas da razão de compressão (r_c), contudo, a presença de produtos residuais reativos (mencionados na sequência) dentro da câmara de combustão provocou o fenômeno da detonação para estas variações de r_c como observado na Figura 15.

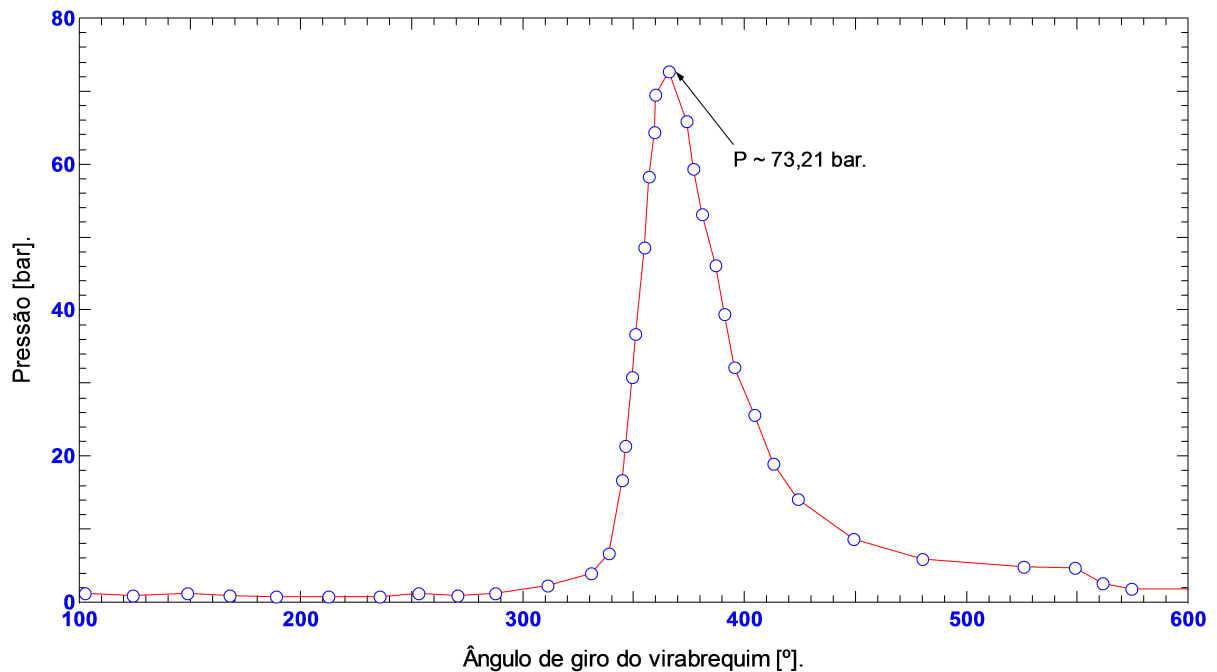
Figura 15: Pressão *versus* ângulo de giro, com presença de detonação.



Fonte: O autor (2017).

Através do processo iterativo para a otimização dos parâmetros de operação do motor, e por meio das rotinas computacionais de deslocamento de equilíbrio químico, atraso de ignição e propagação de chama turbulenta foi possível determinar os valores ótimos apresentados na Tabela 5, coluna 3; tornando possível prever o atraso químico ótimo da combustão em 30°, mesmo em presença de espécies residuais reativas dentro da câmara de combustão.

A Figura 16 apresenta a curva de pressão em função do ângulo de giro do virabrequim em condições ótimas, ou seja, sem variação significativa da razão de compressão e com valor de pressão superior ao apresentado na Figura 14.

Figura 16: Pressão *versus* ângulo de giro, com máxima pressão para o modelo.

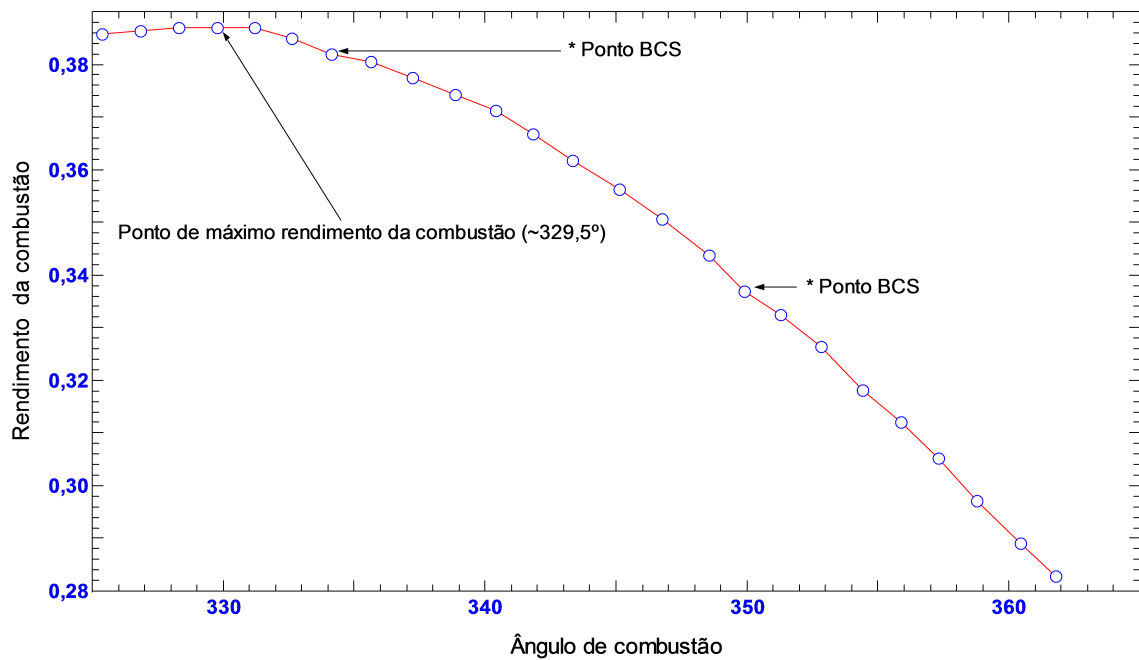
Fonte: O autor (2017).

A partir da otimização dos parâmetros inicialmente propostos foi possível plotar a curva de rendimento *versus* ângulo de combustão (Figura 17), na qual fica evidente um aumento de aproximadamente 42% da eficiência da combustão quando considerado o avanço de ignição em relação ao ponto de combustão padrão (360°). A seguir são expostos (Tabela 6) alguns dos pontos utilizados para a parametrização e criação da Figura 17, dos quais foram desprezados os pontos gerados pelo baixo condicionamento do *software* (BCS).

Tabela 6: Tabela rendimento da combustão por ângulo de combustão.

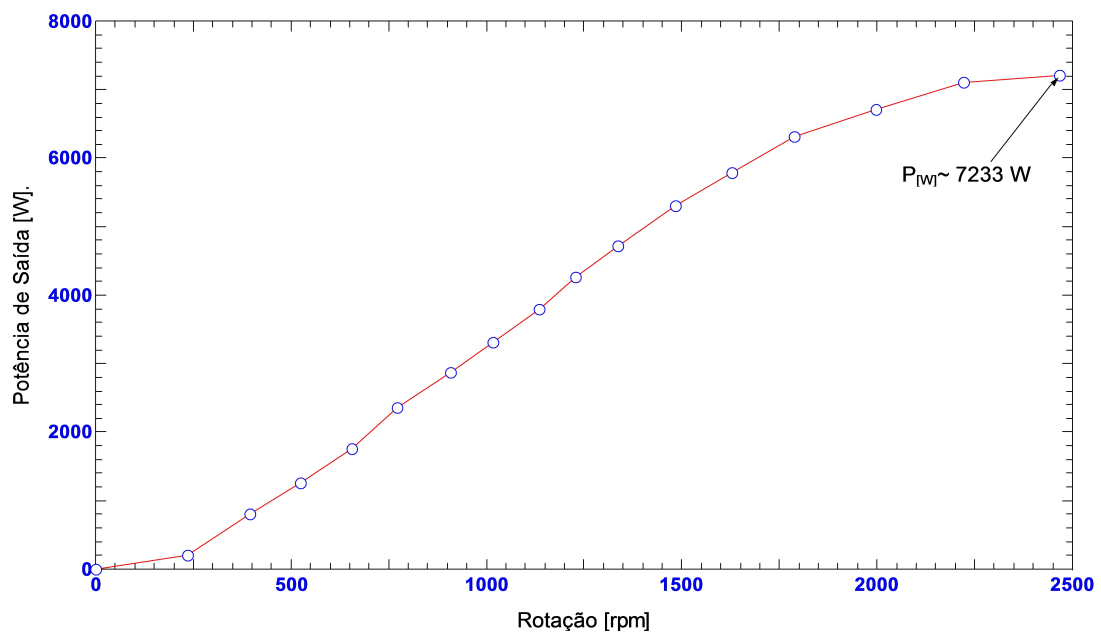
Ângulo de combustão [°]	Rendimento da combustão [%]
328,32	0,386990325
329,78	0,386950125
331,19	0,386911935

Fonte: O autor (2017).

Figura 17: Rendimento *versus* ângulo de combustão.

Fonte: O autor (2017).

Por meio da Figura 18 verificamos que, para as condições estabelecidas na Tabela 5, a máxima potência a uma rotação de 2500 rpm, é de 7233 Watts.

Figura 18: Potência de Saída *versus* Rotação.

Fonte: O autor (2017).

4.3 Frações Residuais

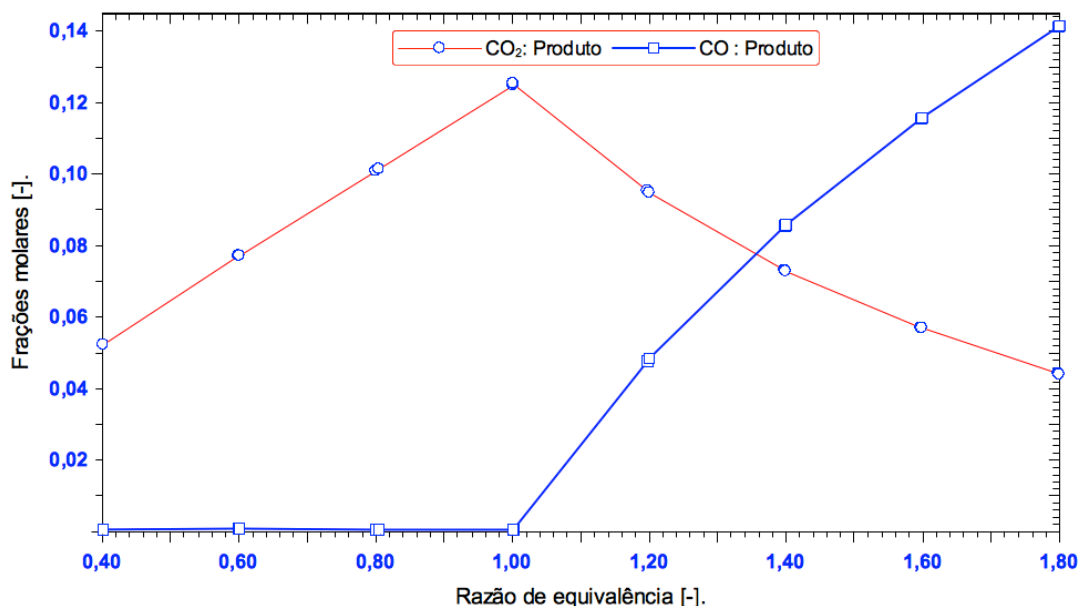
As frações residuais apresentadas nesta subseção são referentes ao processo de combustão descrito anteriormente, onde a variação da razão de equivalência promovia modificações no balanceamento da equação geral da combustão, e portanto, na geração dos gases residuais tornando a análise deste conjunto de equações muito mais complexa. Contudo, fatores como a temperatura, são responsáveis pela variação do equilíbrio químico dos gases de combustão, e adicionam dificuldades ao monitoramento das espécies residuais presentes no sistema.

Neste sentido, as simulações computacionais direcionadas aos cálculos das frações residuais tiveram restrições quanto a temperatura e pressão no sistema combustor.

Assim, a temperatura entre o período de fechamento da válvula de escape e abertura da válvula de admissão foi considerada como constante e igual a 1800°C. A rotação do motor, responsável primária pelo aumento de pressão neste sistema, ficou restrita a faixa de 2500 a 4000 rpm.

Desta forma, foi possível verificar que para razões de equivalência iguais ou superiores a estequiométrica, foram responsáveis pela intensa formação de óxidos instáveis no meio reacional, tais como o monóxido de carbono (CO), representado na Figura 19.

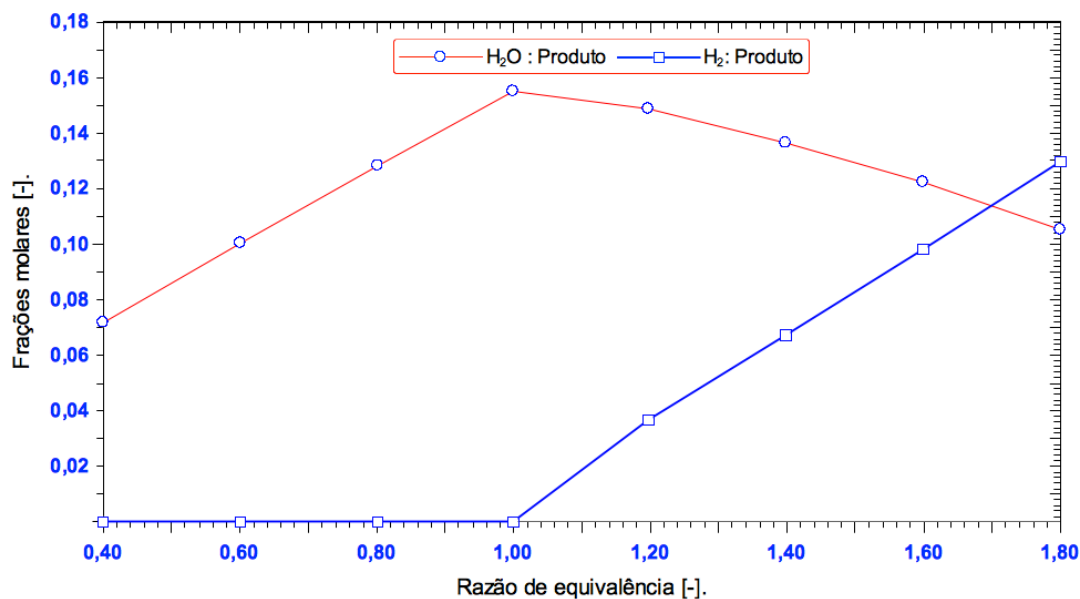
Figura 19: Frações molares de dióxido e monóxido de carbono.



Fonte: O autor (2017).

Por meio da Figura 20, também é possível verificar a instabilidade das espécies formadas. Isto pois, em razões de equivalência iguais ou superiores à unidade há intensa decomposição do vapor de água em hidrogênio (H_2) diatômico e oxigênio dissociado.

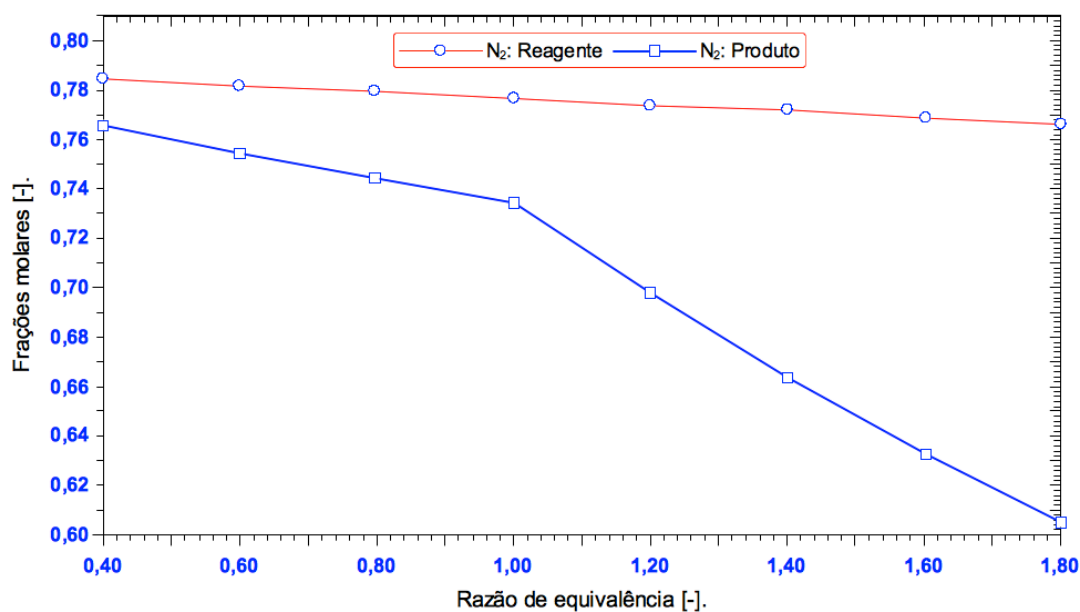
Figura 20: Frações molares de água e hidrogênio.



Fonte: O autor (2017).

Por se tratar de processos em série e/ou paralelo, é possível inferir que a decomposição do vapor de água presente nos produtos da combustão tem grande influência na taxa de consumo do nitrogênio diatômico do conjunto reacional da Figura 21. Tal fator, fica evidente para valores de razão de equivalência superiores a 1. Nesta faixa, a maior presença de oxigênio no meio reacional ocasiona um acentuado consumo de nitrogênio, dando origem aos óxidos nítricos (NO) e nitrosos (N_2O).

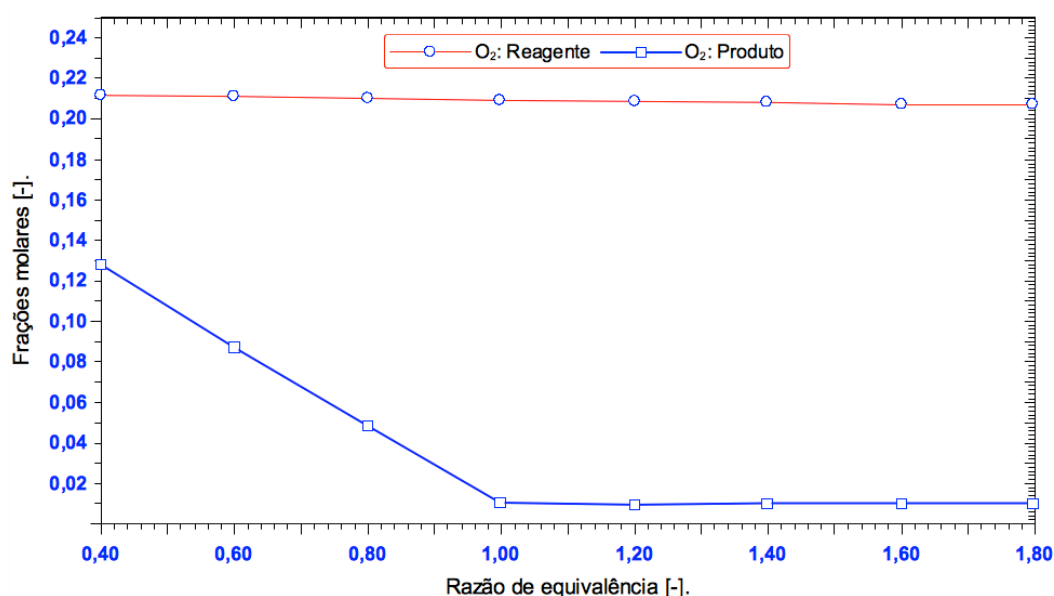
Figura 21: Frações residuais de nitrogênio.



Fonte: O autor (2017).

Na Figura 22, o nível constante de oxigênio nos reagentes e a diminuição abrupta deste nos produtos até próximo de zero, evidencia sua reatividade em reações químicas a elevadas temperaturas e pressões. Fato que intensifica as reações de equilíbrio e modifica significativamente as espécies formadas.

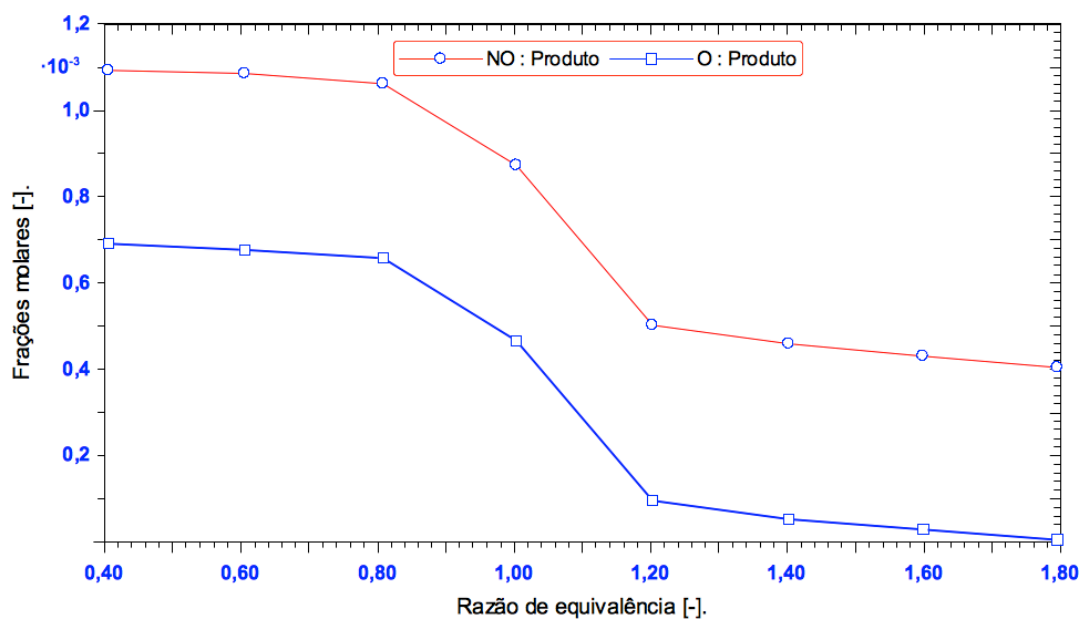
Figura 22: Frações molares de oxigênio.



Fonte: O autor (2017).

A Figura 23, assim como mencionado anteriormente, demonstra a característica reativa do oxigênio em presença de espécies instáveis; tal como o nitrogênio.

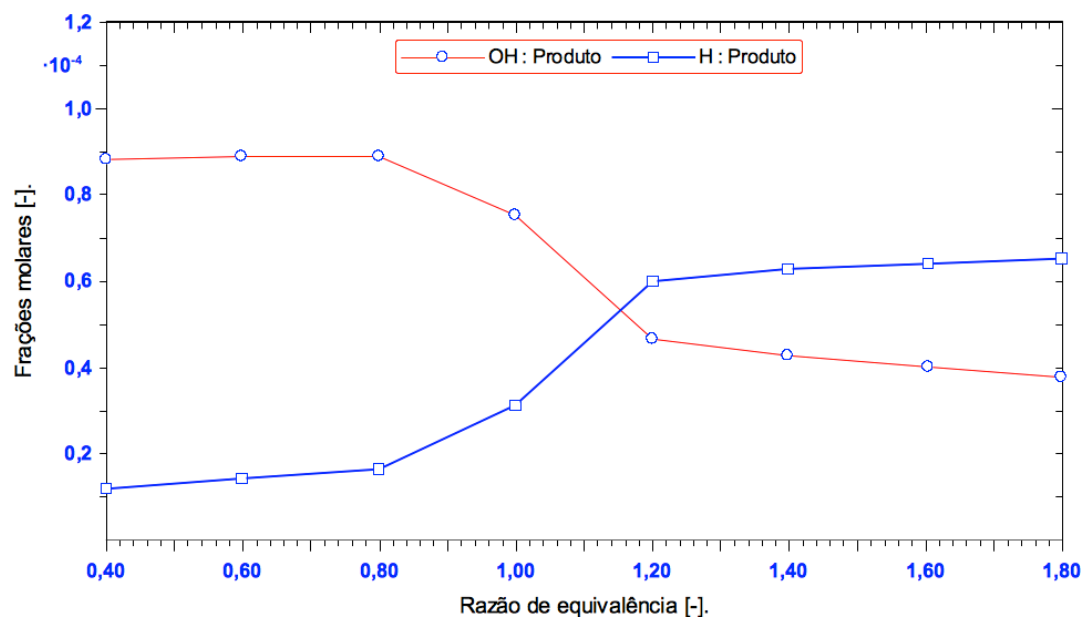
Figura 23: Frações molares de oxigênio e óxido nitroso.



Fonte: O autor (2017).

A Figura 24 apresenta o comportamento reativo da hidroxila (OH) frente a relativa estabilidade do hidrogênio monoatômico.

Figura 24: Frações molares de hidróxido e hidrogênio.



Fonte: O autor (2017).

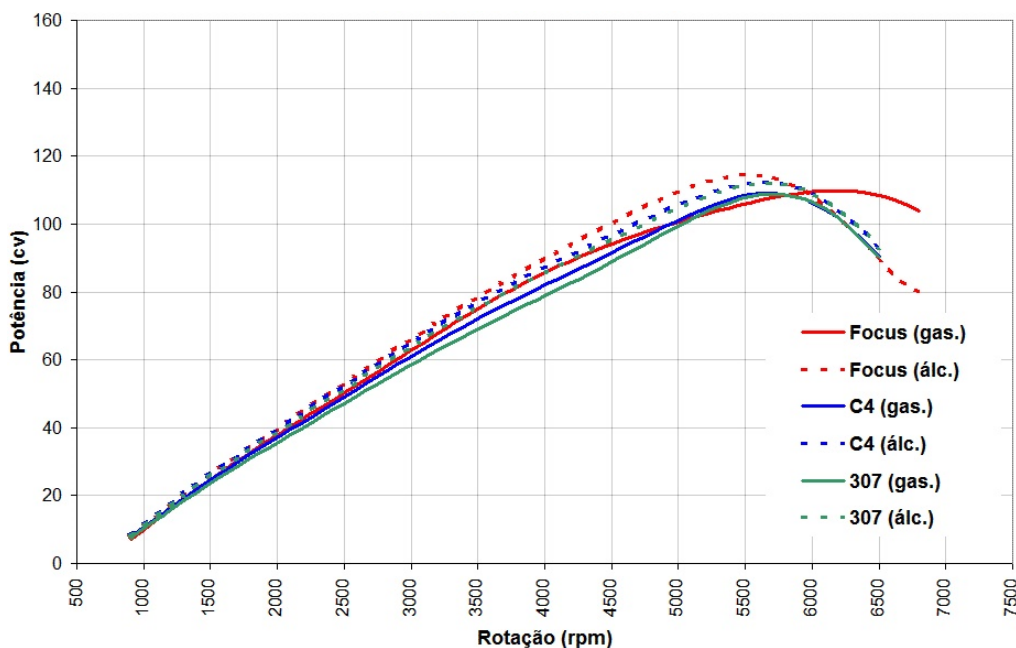
4.4 Resultados Simulados *versus* Experimentais

Os resultados obtidos nas simulações computacionais realizadas com o código escrito em Scilab, quando comparados com valores disponíveis na literatura demonstram que a utilização do modelo quasi-dimensional juntamente com o de cinética química das reações fornece valores de pressão e torque ao menos 13% superiores aos valores obtidos por modelos teóricos e termodinâmicos. Contudo, o objetivo central deste trabalho foi realizar comparações do modelo, aqui, simulado com parâmetros reais de veículos automotores ICE operando a gasolina.

Assim, dados de potência em função da rotação divulgados no endereço eletrônico Best Cars Web Site para três diferentes automóveis, sendo eles: Ford Focus Hatch (V1), Citroën C4 (V2) e Peugeot 307 (V3) foram utilizados na validação do modelo desenvolvido neste trabalho. As características geométricas e operacionais dos motores deste automóveis podem ser verificadas no Anexo 1.

As curvas de potência obtidas para estes automóveis no teste de potência em dinamômetro são representadas na Figura 25.

Figura 25: Potência *versus* rotação para V1, V2 e V3 experimentais.



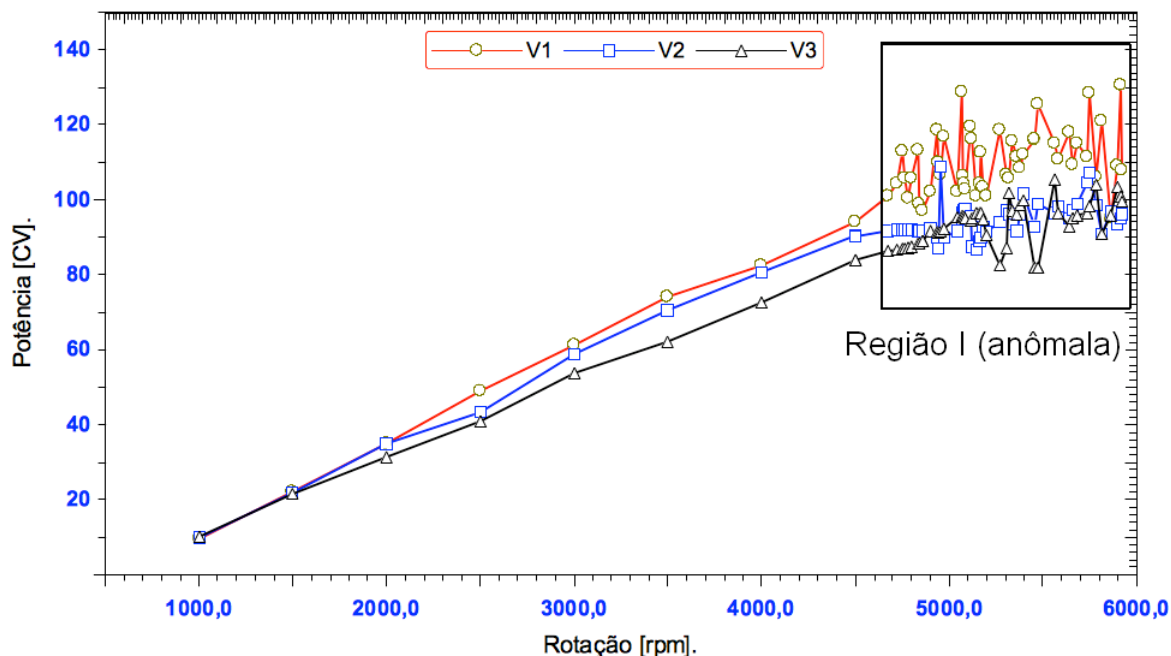
Fonte: <http://bestcars.uol.com.br/>, (Acesso em 17 de setembro de 2017).

Seguindo os padrões técnicos de cada automóvel e operando sob carga plena (borboleta completamente aberta), foram obtidas das simulações computacionais as curvas de potência apresentadas na Figura 26.

Pela análise desta figura, é possível identificar uma região onde as potências apresentam características de detonação da mistura combustível.

Tal região, anômala, tem início próxima ao conjunto de pontos obtidos à rotações iguais a 4500 rpm.

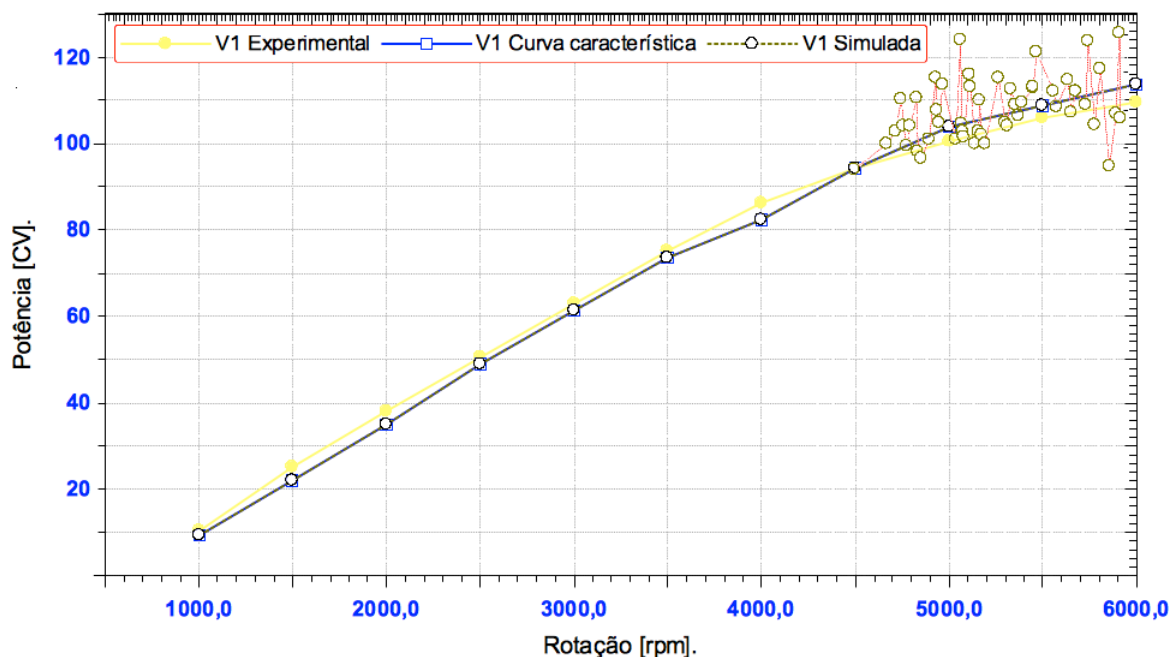
Figura 26: Curva de potência *versus* rotação V1, V2 e V3 simulados.



Fonte: O autor (2017).

O fenômeno ocorrido na região I da Figura 26 pode ser explicado pela provável mudança nas pressões parciais dos gases de equilíbrio quando os motores operam em rotações elevadas, ou também pela mudança e/ou aumento das espécies residuais de combustão.

A seguir a Figura 27, apresenta a redução de pontos feita na região I da curva obtida pelas simulações computacionais para o Ford Focus, de modo que fosse possível a parametrização da curva de potência a rotações superiores a 4500 rpm.

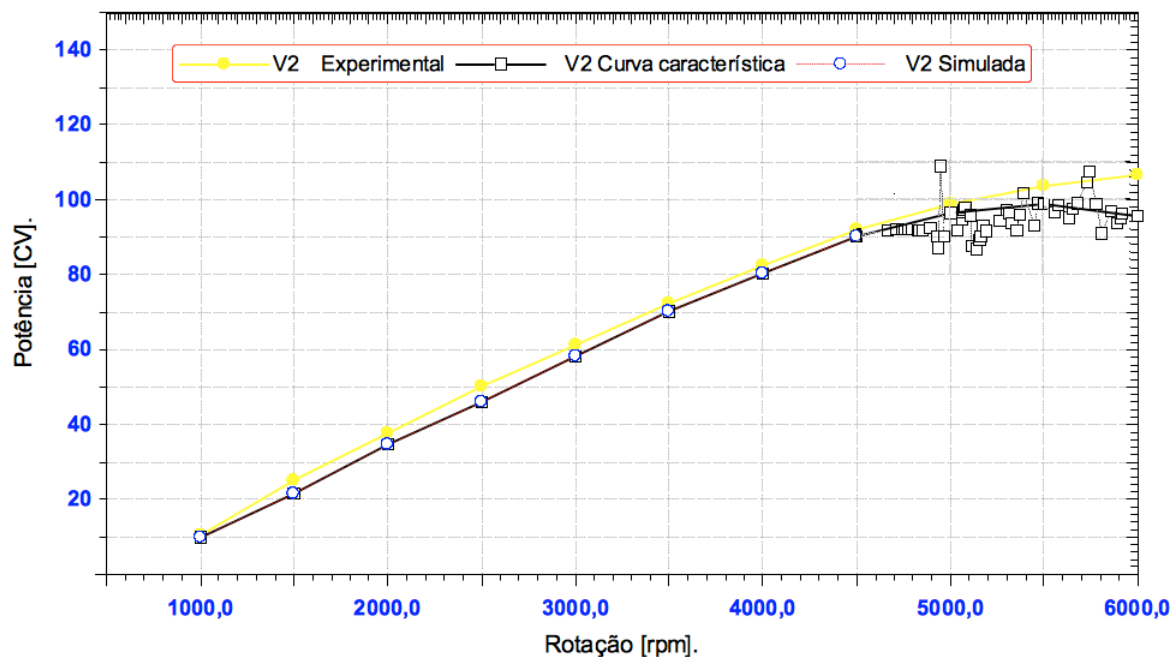
Figura 27: Curva normalizada de potência *versus* rotação para V1.

Fonte: O autor (2017).

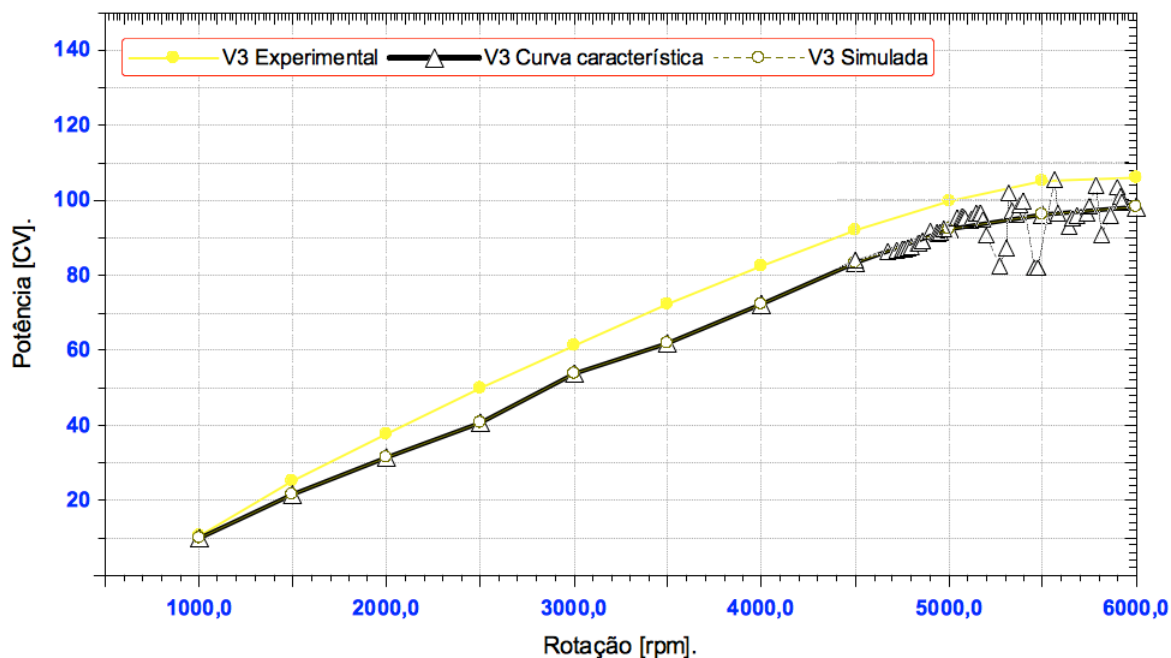
A exclusão dos pontos à rotações elevadas deu-se após comparações entre os valores de potência anômala com os dados gerados pela equações características das curvas simuladas. Tais equações foram geradas utilizando o método dos mínimos quadrados aplicado ao intervalo de 1000 a 4500 rpm e tendo como base a equação polinomial do segundo grau para o ajuste do conjunto de pontos simuladas. Em seguida o intervalo inicial foi estendido superiormente para 6000 rpm visando a obtenção de dados sem a influência do fenômeno da denotação (Figura 27, curva vermelha).

Para a efetiva exclusão e parametrização das curvas simuladas, foi estabelecido que qualquer ponto anômalo que tivesse distância vertical superior a 7% em relação a curva característica analisada não pertencia ao conjunto de pontos a serem normalizados.

Desta forma, foi possível por meio das simulações computacionais gerar conjuntos de pontos os quais representam as curvas de potência dos veículos V1 (Figura 27), V2 (Figura 28) e V3 (Figura 29) em rotações de 1000 a 6000 rpm, tornando possível a comparação com os valores de potência experimental dos veículos mencionados.

Figura 28: Curva normalizada de potência *versus* rotação para V2.

Fonte: O autor (2017).

Figura 29: Curva normalizada de potência *versus* rotação para V3.

Fonte: O autor (2017).

A tabela 7, apresenta os valores de potência real dos automóveis V1, V2 e V3 seguidos pelo valor gerado nas simulações, assim como o erro relativo entre estes dados.

Tabela 7: Tabela comparativa de potência experimental e simulada para V1, V2 e V3.

Rotações (rpm).	Potência experimental (CV).	Potência simulada (CV).	Erro Relativo (%).
V1 - Ford Focus Hatch.			
1000	10,283	9,301	9,550
1500	25,068	22,12	11,760
2000	38,180	34,867	8,677
2500	50,392	48,943	2,875
3000	62,862	61,254	2,558
3500	75,074	73,505	2,090
4000	86,257	82,367	4,510
4500	94,354	94,245	0,116
5000	100,521	103,902	3,363
5500	106,044	108,795	2,594
6000	109,510	113,725	3,849
			Média: 4,722
V2 - Citroën C4			
1000	10,283	9,943	3,306
1500	25,068	21,663	13,583
2000	37,537	34,756	7,409
2500	49,878	45,965	7,845
3000	61,318	58,357	4,829
3500	72,373	70,291	2,877
4000	82,527	80,389	2,591
4500	92,038	90,252	1,941
5000	101,421	96,528	4,824
5500	108,745	98,885	9,067
6000	106,680	95,639	10,350
			Média: 6,238
V3 - Peugeot 307			
1000	10,283	9,929	3,443
1500	25,068	21,493	14,261
2000	37,537	33,395	11,034
2500	49,878	42,667	14,457
3000	61,318	53,711	12,406
3500	72,373	61,94	14,416
4000	82,527	72,456	12,203
4500	92,038	83,433	9,349
5000	101,421	92,217	9,075
5500	108,745	96,195	11,541
6000	106,680	98,369	7,791
			Média: 10,906

Fonte: O autor (2017).

Ainda de acordo com a Tabela 7 e com as Figuras 27, 28 e 29 é possível verificar que as curvas de potência em função da rotação obtidas pelas simulações numéricas computacionais aproximam-se significativamente das curvas de potência experimentais para os três veículos apresentados neste trabalho. Tal fato fica explícito por meio da média dos erros entre valores de potência experimentais e simulados, os quais não ultrapassa 11%. Contudo, tais erros poderiam ser reduzidos caso fossem considerados no algoritmo construído, os seguintes fatores:

- Combustão sem restrição de fase física para as espécies envolvidas;
- Adoção de equações não lineares para o cálculo das derivadas do volume;
- Utilização da cinética química durante todas as etapas do ciclo motor.

5 CONCLUSÃO

O presente trabalho teve como principal objetivo o estudo do atraso químico da combustão do iso-octano ($i - C_8H_{18}$) no ciclo motor Otto, para tanto foram realizadas simulações computacionais, com software desenvolvido pelo autor, em linguagem de programação Scilab.

Visando resultados próximos da realidade, a pressão de cada estágio motor foi calculada utilizando o modelo de duas zonas com a adição de expressões semi-empíricas de condutividade térmica para as massas queimadas e não queimadas; as equações instantâneas de temperatura e pressão foram implementadas utilizando equações diferenciais ordinárias características do modelo quasi-dimensional para motores de combustão interna.

A equação do gás ideal foi utilizada com o objetivo de reduzir as dificuldades matemáticas e de demanda computacional inerentes ao processo numérico simulado.

O atraso químico da combustão, foco deste trabalho, foi implementado com o auxílio da rotina computacional desenvolvida por GUIMARÃES (2016), com a qual foi possível reduzir o número de etapas/equações do processo de combustão do iso-octano. Tal redução viabilizou a determinação do ângulo de máxima potência o qual atingiu valores próximos de 30° sem a ocorrência de anomalias e fenômenos, tais como: *knock* (batida de pino) e de detonação.

Visando a validação dos resultados calculados pelo algoritmo desenvolvido neste trabalho, as curvas de potência de três automóveis (V1, V2 e V3) distintos foram utilizadas como modelos comparativos. Então, após inicializar o código com as características técnicas destes automóveis foi possível afirmar que a diferença/erro máximo entre os valores experimentais e simulados não foram superiores a 11%.

Desta forma, conclui-se que o presente trabalho atingiu o objetivo inicial de determinação do atraso químico da combustão, de modo a otimizar este processo através da estimativa do ângulo de avanço da ignição. Contudo, é importante salientar que a contribuição deste trabalho não restringiu-se ao objetivo inicial, ao passo que foram apresentadas

breves discussões na seção dos resultados sobre temas correlatos, os quais serão de forma explícita enumerados a seguir como sugestões para o desenvolvimento aprofundado em trabalhos futuros.

Assim, como sugestão para trabalhos futuros, seguem alguns temas e melhorias para o processo de combustão em motores ICE:

- Expandir o número de espécies residuais associadas a combustão;
- Utilizar equações de estado para o cálculo das derivadas ordinárias de pressão;
- Considerar a participação de espécies líquidas na combustão;
- Calcular o deslocamento de equilíbrio químico pelo método de minimização de energia livre de Gibbs;
- Considerar a velocidade das reações de equilíbrio químico para análise das pressões parciais em cada instante de giro do eixo virabrequim.

6 REFERÊNCIA

- [1] K. Annamalai and I. K. Puri, “Combustion science and engineering, crc series in computational mechanics and applied analysis,” 2005.
- [2] D. Bertoldi *et al.*, “Simulação numérica de um modelo simplificado de um motor à combustão interna a gás natural,” 2007.
- [3] Y. A. Cengel and M. A. Boles, “Thermodynamics: an engineering approach,” *Sea*, vol. 1000, p. 8862, 2006.
- [4] M. Chiodi, *An innovative 3D-CFD-approach towards virtual development of internal combustion engines*. Springer, 2011.
- [5] J. A. de Carvalho Souza Jr, *Emissões em processos de combustão*. Unesp, 2003.
- [6] A. L. de Souza Canelas, “Evolução da importância econômica da indústria de petróleo e gás natural no brasil: contribuição a variáveis macroeconômicas,” Ph.D. dissertation, UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO, 2007.
- [7] C. R. Ferguson and A. T. Kirkpatrick, *Internal combustion engines: applied thermo-sciences*. John Wiley & Sons, 2015.
- [8] H. S. Fogler, *Elementos de engenharia das reações químicas: Comsol Multiphysics*. LTC, 2009.
- [9] A. S. Guimarães, “Um algoritmo para simplificar sistemas de equações diferenciais que descrevem a cinética de reações químicas,” Ph.D. dissertation, Universidade de São Paulo, 2016.
- [10] M. D. Koretsky, “Termodinâmica para engenharia química,” *Rio de Janeiro, LTC*, 2007.

- [11] M. A. Liberman, *Introduction to physics and chemistry of combustion: explosion, flame, detonation*. Springer Science & Business Media, 2010.
- [12] J. M. X. Mao-zhao, “A chemical kinetics model of iso-octane oxidation for hcci engine (2) - a new skeleton mechanism [j],” *Transactions of CSICE*, vol. 4, p. 002, 2006.
- [13] M. J. Pilling, *Low-temperature combustion and autoignition*. Elsevier, 1997, vol. 35.
- [14] S. Y. Ribeiro, J. A. da Silva, and M. Moura, “Eficiência volumétrica em motor monocilíndrico de combustão interna a gasolina.”
- [15] L. Sileghem, T. Wallner, and S. Verhelst, “A quasi-dimensional model for si engines fueled with gasoline–alcohol blends: Knock modeling,” *Fuel*, vol. 140, pp. 217–226, 2015.
- [16] R. Stone, *Introduction to internal combustion engines*. Palgrave Macmillan, 2012.
- [17] S. R. Turns *et al.*, *An introduction to combustion*. McGraw-hill New York, 1996, vol. 287.
- [18] J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble, and J. Warnatz, *Combustion*. Springer, 1997, vol. 3.

6 ANEXOS

6.1 Anexo 1 : Características geométricas e operacionais

Ficha técnica			
	C4	Focus	307
MOTOR			
Posição	transversal		
Cilindros	4 em linha		
Material do bloco/cabeçote	ferro fundido/alumínio	alumínio	ferro fundido/alumínio
Comando de válvulas	duplo no cabeçote		
Válvulas por cilindro	4		
Diâmetro e curso	78,5 x 82 mm	79 x 81,4 mm	78,5 x 82 mm
Cilindrada	1.587 cm ³	1.596 cm ³	1.587 cm ³
Taxa de compressão	11:1		10,5:1
Alimentação	injeção multiponto sequencial		
Potência máxima (gas.)	110 cv a 5.600 rpm	109 cv a 6.250 rpm	110 cv a 5.600 rpm
Potência máxima (álc.)	113 cv a 5.600 rpm	116 cv a 5.500 rpm	113 cv a 5.600 rpm
Torque máximo (gas.)	14,5 m.kgf a 4.000 rpm	15,4 m.kgf a 4.250 rpm	14,2 m.kgf a 4.000 rpm
Torque máximo (álc.)	15,8 m.kgf a 4.000 rpm	16,3 m.kgf a 4.250 rpm	15,5 m.kgf a 4.000 rpm
Potência específica (gas./álc.)	69,3 / 71,2 cv/l	68,2 / 72,7 cv/l	69,3 / 71,2 cv/l

Fonte: <http://bestcars.uol.com.br/>, (Acesso em 17 de setembro de 2017).