

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA
CENTRO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE
PROCESSOS**

**ANÁLISE EXPERIMENTAL E MODELAGEM DE MOTOR DE
COMBUSTÃO INTERNA OPERANDO COM ETANOL SUPER-
HIDRATADO**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Weslei Monteiro Ambrós

Santa Maria, RS, Brasil

2012

ANÁLISE EXPERIMENTAL E MODELAGEM DE MOTOR DE COMBUSTÃO INTERNA OPERANDO COM ETANOL SUPER- HIDRATADO

por

Weslei Monteiro Ambrós

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos, Área de Concentração em Controle ambiental e otimização energética, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Engenharia de Processos**.

Orientadores:

Prof. Damaris Kirsch Pinheiro, Dr. Eng^a

Prof. Nina Paula Gonçalves Salau, Dr. Eng^a

Santa Maria, RS, Brasil

2012

**Universidade Federal de Santa Maria
Centro de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos**

A Comissão Examinadora, abaixo assinada,
aprova a Dissertação de Mestrado

**ANÁLISE EXPERIMENTAL E MODELAGEM DE MOTOR DE
COMBUSTÃO INTERNA OPERANDO COM ETANOL SUPER-
HIDRATADO**

elaborada por
Weslei Monteiro Ambrós

como requisito parcial para obtenção do grau de
Mestre em Engenharia de Processos

COMISSÃO EXAMINADORA:

Damaris Kirsch Pinheiro, Dr.
(Presidente/Orientadora)

Nina Paula Gonçalves Salau, Dr.
(Orientadora)

Paulo Romeu Moreira Machado, Dr. (UFSM)

Ademar Michels, Dr. (FAHOR)

Santa Maria, 28 de março de 2013.

AGRADECIMENTOS

A Universidade Federal de Santa Maria, por sempre proporcionar um ambiente acolhedor e de conhecimentos, os quais serão levados ao longo de toda vida profissional.

A Prof^a Dr^a. Damaris Kirsch Pinheiro, pela orientação e confiança depositada nas atividades realizadas e pelo especial subsídio no que se refere à área de análise e monitoramento de gases.

A Prof^a Dr^a. Nina Paula Gonçalves Salau, que abraçou as dificuldades de seus orientados, e pelo valoroso empenho nas atividades de modelagem, simulação e análise de dados.

Ao Prof^o Dr. Mario Eduardo Santos Martins pela disponibilização do motor de testes para coleta de dados, indispensável à realização deste trabalho.

Ao Prof^o Dr. Ronaldo Hoffmann pela disponibilização do analisador de gases, essencial para a coleta de dados de emissões.

Ao Eng^o Mecânico Thompson Diordinis Metzka Lazzanov e ao acadêmico do curso de Engenharia Mecânica Rafael Lago Sari pelo auxílio na coleta e disposição de dados e pelo aporte técnico na área de aquisição de dados em motores.

Aos colegas Jean Lucca Fagundez, Augusto Cesar da Costa e Márcia Bertê pelo auxílio nos trabalhos desenvolvidos ao longo do curso de mestrado.

A Capes, pela concessão da bolsa de estudos.

A todos aqueles que de forma direta ou indireta auxiliaram na realização deste trabalho.

RESUMO

Dissertação de Mestrado
Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos
Universidade Federal de Santa Maria

ANÁLISE EXPERIMENTAL E MODELAGEM DE MOTOR DE COMBUSTÃO INTERNA OPERANDO COM ETANOL SUPER- HIDRATADO

AUTOR: WESLEI MONTEIRO AMBRÓS
ORIENTADOR: DAMARIS KIRSCH PINHEIRO
Santa Maria, 28 de março de 2013.

O uso de etanol como combustível tem fomentado muitos países a aperfeiçoarem seus processos de produção. Contudo, os custos relacionados ao seu atual modelo de produção têm sido ocasionalmente apontados como uma desvantagem a utilização deste biocombustível. Entre estes custos destaca-se o gasto energético necessário para destilação eficiente do mosto fermentado, cujo produto final é o chamado etanol hidratado (cerca de 95% em volume de etanol em água). Uma alternativa promissora para a redução deste custo é o uso de etanol combustível com altas frações de água (acima de 5% em volume), o chamado etanol super-hidratado. Com isto em vista, neste estudo é proposta a elaboração de um modelo matemático que, em conjunto com dados experimentais, seja capaz de prever o efeito que o uso de etanol super-hidratado tem no desempenho de motores de combustão interna. Para tanto, em conjunto com o etanol hidratado comercial foram preparadas misturas de etanol com as seguintes frações volumétricas de água: 10% (E90W10), 20% (E80W20), 30% (E70W30) e 40% (E60W40). Os ensaios foram realizados considerando-se duas condições operacionais do motor: a) ponto de ignição fixo b) o ponto de ignição avançado para obtenção do torque máximo do motor. O modelo foi capaz de simular de forma satisfatória os gradientes de pressão e temperatura no cilindro e apresentou uma boa capacidade de previsão do desempenho do motor, avaliado a partir das variações de potência, torque, eficiência de conversão e consumo específico de combustível. Exceto para o consumo específico de combustível, onde o erro estimado para as variações foi maior que 20%, a estimativa para as variações nos demais parâmetros de desempenho apresentou erros relativos menores que 7%. Para as variações das condições de ensaio o erro relativo foi menor que 13%. Também foi observado que o consumo específico de combustível aumentou gradualmente com o aumento do teor de água. Dentre os combustíveis testados, o E70W30 exibiu o melhor desempenho, seguida pela mistura E80W20, sendo que ambos apresentaram rendimentos maiores do que o etanol comercial.

ABSTRACT

Master Thesis
Graduate Program in Process Engineering
University of Santa Maria

EXPERIMENTAL ANALYSIS AND MODELING OF INTERNAL COMBUSTION ENGINE FUELLED BY WET ETHANOL FUEL

AUTHOR: WESLEI MONTEIRO AMBRÓS

ADVISOR: DAMARIS KIRSCH PINHEIRO

Santa Maria, March 28, 2013.

The use of ethanol as fuel has encouraged many countries to improve their production for this purpose. However, costs relating to their current production model have been occasionally mentioned as a drawback to its use. Among these stands out costs the energy expenditure necessary for distillation of the wort, which creates a final product with approximate composition of 95% by volume of ethanol in water. An alternative to disposal cost of this would be the use of ethanol with high water content (above 5% by volume). With this in mind, this study aims to develop a mathematical model that, together with experimental data, assess the effect that the use of alcohol fuel blends super hydrated has on the performance of spark ignition engines. For this, together with the commercial hydrous ethanol, blends were prepared with volume fractions of 90% (E90W10), 80% (E80W20), 70% (E70W30) and 60% (E60W40) ethanol in water and tests conducted in which maintained the ignition point and the fixed point which is advanced to obtain the maximum brake torque (MBT). The model has presented a good agreement with pressure gradients and temperature in the cylinder and predicted changes in power, torque, efficiency and specific consumption of ethanol with relative errors less than 7%. For the variations in the test conditions the relative error was less than 13%. However, improvements must be made to calculate the mass of water in the mixture. The specific consumption of the mixture gradually increased with water content on the blend. Among fuels tested, E70W30 exhibited the best performance, followed by E80W20, both of which had higher yields than the commercial ethanol.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Produção e consumo mundial de petróleo no período 2001-2011.....	25
Figura 2 - Ponto de ignição em graus antes do PMS (<i>degrees before top dead center</i> , °BTDC) e eficiência térmica etanol hidratado em comparação com a gasolina tipo C.....	30
Figura 3 - Emissões do etanol hidratado em comparação com a gasolina tipo C..	30
Figura 4 - Vendas de etanol ¹ e gasolina automotiva ² no Brasil - 2001-2010.....	31
Figura 5 - Razão entre a energia necessária para destilação do etanol e o poder calorífico inferior do produto (<i>Lower Heating Value</i>).	32
Figura 6 - Comparação do custo energético do etanol anidro e do etanol super hidratado com composição de 35% em volume.....	34
Figura 7 - Ângulos de ligação entre moléculas de etanol e água.....	35
Figura 8 - Efeito da fração de água no poder calorífico do etanol.....	36
Figura 9 - Elementos básicos de um motor de combustão interna ciclo Otto e ciclo Diesel.....	38
Figura 10 - Geometria básica de um motor de combustão interna recíproco.....	39
Figura 11 - Ciclo de operações de quatro tempos.....	39
Figura 12 - Sequência de eventos no ciclo de operações de um motor SI.	41
Figura 13 - Temperatura de chama adiabática em função da razão de equivalência para diferentes misturas de etanol super-hidratado.	45
Figura 14 - Parâmetros de desempenho para diferentes misturas de etanol super-hidratado	46
Figura 15 – Taxa de liberação de calor para misturas de etanol super-hidratado..	47
Figura 16 - Consumo específico de combustível (bsfc) e eficiência térmica global para misturas de etanol super-hidratado.....	48
Figura 17 - Temperatura média dos gases de exaustão para diferentes misturas etanol-água.	49
Figura 18 - Fração volumétrica de CO ₂ nos gases de exaustão para diferentes misturas etanol-água.....	49
Figura 19 - Dados de emissões para o HC e o CO em motor HCCI de quatro cilindros em função do CA50.....	50

Figura 20 - Dados de emissões para o CO, HC e NO _x em motor ciclo Otto modelo Honda em função da fração de água no combustível.	51
Figura 21 – Primeiro diagrama pressão-volume experimental obtido por Otto em 18/05/1876.	52
Figura 22 - Tempo computacional associado a ferramentas usadas para simulação do ciclo de operação de motores.	55
Figura 23 - Comparação entre estimativas da pressão e temperatura do cilindro por três diferentes modelos.	56
Figura 24 - Representação do sistema analisado mediante o modelo de duas zonas	59
Figura 25 - Procedimento utilizado para ajuste e validação do modelo termodinâmico.....	83
Figura 26 - Motor Agrale M-90 comercial.	86
Figura 27 - Densímetro Anton Paar DMA 4500M.....	88
Figura 28 - ECU FT400 da FuelTech.	90
Figura 29 - Motor montado no sistema de frenagem.....	91
Figura 30 - Sistema de medição e alimentação de combustível.	92
Figura 31 - Vista do painel frontal do analisador CMS-7.....	95
Figura 32 - Esquema do aparato experimental utilizado.	100
Figura 33 - Curvas experimentais de pressão obtidas no teste com ponto fixo.	108
Figura 34 - Pressão no cilindro durante a fase de combustão (ensaio PF).....	109
Figura 35 - Curvas experimentais de pressão obtidas no teste MBT.....	112
Figura 36 - Pressão no cilindro durante a fase de combustão (ensaio MBT).....	113
Figura 37 - Curva de fração mássica queimada gerada no GT-Power para o E95W5 no ensaio PF.....	116
Figura 38 - Diagrama de pressão simulada versus experimental para o EHC no ensaio PF.....	118
Figura 39 - Volume específico da água e do etanol nas fases de compressão e combustão do EHC (MBT).	119
Figura 40 - Gradiente de temperatura no cilindro obtido na simulação do EHC (PF).....	119
Figura 41 - Diagrama PV obtido na simulação com o EHC (PF).....	120

Figura 42 - Pressão, temperatura e diagrama PV obtidos na simulação do E90W10 (ponto fixo).	121
Figura 43 - Pressão, temperatura e diagrama PV obtidos na simulação do E80W20 (ponto fixo).	122
Figura 44 - Temperatura e diagrama PV obtidos na simulação do E70W30 (ponto fixo).	122
Figura 45 - Pressão obtida na simulação do E70W30 (ponto fixo).....	123
Figura 46 - Temperatura e diagrama PV obtidos na simulação do E60W40 (ponto fixo).	123
Figura 47 - Pressão, temperatura e diagrama PV simulados para o EHC (MBT). .	127
Figura 48 - Pressão, temperatura e diagrama PV simulados para o E90W10 (MBT).	128
Figura 49 - Pressão, temperatura e diagrama PV simulados para o E80W20 (MBT).	129
Figura 50 - Pressão simulada para o ensaio E70W30 (MBT).	129
Figura 51 - Temperatura e diagrama PV simulados para o E70W30 (MBT).	130
Figura 52 - Pressão, temperatura e diagrama PV simulados para o E60W40 (MBT).	130
Figura 53 - Potência experimental e simulada em função da fração de água no combustível.	133
Figura 54 - Torque de frenagem e simulado em função da fração de água no combustível.	134
Figura 55 - Consumo específico de etanol experimental e simulado em função da fração de água no combustível.	136
Figura 56 - Consumo específico experimental e simulado da mistura em função da fração de água no combustível.	137
Figura 57 - Eficiência de conversão experimental e simulado da mistura em função da fração de água no combustível.	139
Figura 58 - Comparação entre as emissões nos ensaios com ponto fixo e com torque máximo.....	140
Figura 59 - Temperatura de exaustão dos gases.....	142

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Comparação de propriedades do etanol, gasolina e Diesel.	28
Tabela 2 - Fatores de emissão de escapamento zero km, em g/km. Fonte: 1º Inventário Nacional de Emissões Atmosféricas por Veículos Automotores Rodoviários, 2011, p. 34.	44
Tabela 3 - Produtos de combustão à baixa temperatura, vi (mols/mols de ar). Fonte: FERGUSON, 1986, p. 109.	66
Tabela 4 - Valores de C1 e C2 na correlação de Woschni. Fonte: Lounici <i>et al.</i> , 2010, p. 10.	72
Tabela 5 - Equações de equilíbrio que expressam o efeito da dissociação em diferentes espécies.	78
Tabela 6 - Características do etanol de posto e de destilaria utilizados nos testes.	88
Tabela 7 - Misturas utilizadas no ensaio com torque máximo.	89
Tabela 8 - Misturas utilizadas no ensaio com ponto de ignição fixo.	89
Tabela 9 - Configurações de medida e parâmetros de entrada usados nos ensaios	96
Tabela 10 - Condições operacionais estabelecidas e resultados medidos no ensaio com ponto fixo.	105
Tabela 11 - Parâmetros calculados a partir dos dados experimentais do ensaio com ponto fixo.	106
Tabela 12 - Concentração de gases na exaustão durante o ensaio com ponto fixo.	107
Tabela 13 - Principais valores de pressão no cilindro para as misturas de combustível (ensaio com ponto fixo).	108
Tabela 14 - Condições operacionais estabelecidas e resultados medidos no ensaio MBT.	110
Tabela 15 - Parâmetros calculados dos dados experimentais do ensaio MBT.	110
Tabela 16 - Concentração de gases de escape no ensaio MBT.	111
Tabela 17 - Principais valores de pressão no cilindro para as misturas de combustível (ensaio MBT).	112
Tabela 18 - Características geométricas do motor.	114

Tabela 19 - Parâmetros de operação utilizados nas simulações do ensaio com ponto fixo.....	115
Tabela 20 - Valores iniciais de a e n estimados no ensaio com ponto fixo.	116
Tabela 21 - Coeficientes estimados para as misturas de etanol super-hidratado no ensaio com ponto fixo.	117
Tabela 22 - Parâmetros obtidos da simulação do EHC (PF).....	120
Tabela 23 - Principais parâmetros obtidos nas simulações com ponto de ignição fixo.	124
Tabela 24 - Parâmetros de operação utilizados nas simulações do ensaio MBT.	125
Tabela 25 - Estimativa inicial dos coeficientes da equação de Wiebe (MBT).	126
Tabela 26 - Coeficientes estimados para as misturas de etanol super-hidratado no ensaio MBT.	126
Tabela 27 - Principais parâmetros obtidos na simulação do EHC (MBT).....	128
Tabela 28 - Principais parâmetros das simulações (MBT).	131
Tabela 29 - Variações relativas de potência para cada mudança no combustível.	133
Tabela 30 - Variação relativa de potência entre os dois ensaios.	133
Tabela 31 - Variações percentuais do torque para cada mudança no combustível.	135
Tabela 32 - Variação relativa do torque entre os ensaios.	135
Tabela 33 - Variações relativas do consumo específico de etanol para cada mudança no combustível.	136
Tabela 34 - Variação relativa do consumo específico de etanol entre os ensaios.	136
Tabela 35 - Variações relativas do consumo específico da mistura para cada mudança no combustível.	138
Tabela 36 - Variação relativa do consumo específico de mistura entre os ensaios.	138
Tabela 37 - Variações relativas no rendimento para cada mudança no combustível.	139
Tabela 38 - Variação relativa da eficiência de conversão entre os ensaios.	139

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 - Características do motor: Configuração original x modificada.	87
Quadro 2 - Especificações do sensor GH14D. Fonte: www.avl.com (acessado em 17/12/2012).	93

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ANFAVEA	Associação Nacional dos Fabricantes de Veículos Automotores
ANP	Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis
ATM	Massa média admitida por revolução, do inglês <i>Averaged Trapped Mass</i>
CAD	Crank angle degree: ângulo de manivela ou ângulo de virabrequim
CA50	Ângulo de virabrequim no qual ocorre 50% da liberação de calor
CFD	Computer Fluid Dynamics: Fluidodinâmica Computacional
CH ₃ OO	Radical peroximetil
CH ₄	Metano
CO	Monóxido de carbono
CO ₂	Dióxido de carbono
CPU-time	Tempo de processamento associado às simulações computacionais
EAC	Etanol anidro combustível
EDO	Equação Diferencial Ordinária
EEA	European Environment Agency: Agência Ambiental Européia
EGR	Exhaust Gas Recirculation
EHC	Etanol hidratado combustível
EPA	U.S. Environmental Protection Agency: Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos
E90W10	Mistura de etanol superhidratado com concentração volumétrica de 90% de etanol e 10% de água
E80W20	Mistura de etanol superhidratado com concentração volumétrica de 80% de etanol e 20% de água
E70W30	Mistura de etanol superhidratado com concentração volumétrica de 70% de etanol e 30% de água
E60W40	Mistura de etanol superhidratado com concentração volumétrica de 60% de etanol e 40% de água

FARG	Fuel-air residual gases: rotina para determinar o estado inicial da mistura entre ar, combustível e gases residuais
GEEs	Gases do efeito estufa
H	Hidrogênio (átomo)
H ₂	Hidrogênio (molécula)
H ₂ O	Água
HC	Hidrocarbonetos não queimados
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition Engine: motor de ignição por compressão de carga homogênea
HO ₂	Radical hidroperoxila
IPCC	Intergovernmental Panel on Climate Change: Painel Intergovernamental de Mudanças Climáticas
JANAF	Tabelas que compilam dados termodinâmicos para diversos compostos e elementos, publicadas pela National Bureau of Standards (Secretaria Nacional de Padrões)
MBT	Maximum Brake torque: torque de frenagem máximo
N ₂	Nitrogênio (molécula)
N ₂ O	Óxido nitroso
NIATI	National Institute for Advanced Transportation Technology
NMHC	Non methane hydrocarbons: hidrocarbonetos exceto o metano
N-N	Ligação entre os átomos de nitrogênio
NO	Óxido de nitrogênio
NO ₂	Dióxido de nitrogênio
NO _x	Óxidos de nitrogênio
O	Oxigênio (átomo)
O ₂	Oxigênio (molécula)
OH	Radical hidroxila
OICA	Organisation Internationale des Constructeurs d'Automobiles: Organização Internacional dos Construtores de Automóveis
°BTDC	Degrees Before Top Dead Center: graus antes do ponto morto superior
°INPM	Porcentagem de álcool em peso, unidade utilizada pelo Instituto Nacional de Pesos e Medidas

PAN	Nitrato de peroxiacetil
PF	Ponto fixo – referência a um dos métodos de ensaio usados
PCI	Poder calorífico inferior
PMI	Ponto morto inferior
PMS	Ponto morto superior
SMOG	Junção de "smoke" (fumaça) e "fog" (nevoeiro): poluição atmosférica derivada de reações fotoquímicas de emissões
TCA	Temperatura de chama adiabática
TP	Throttle Position: válvula de controle de aceleração

LISTA DE SÍMBOLOS

A	área ocupada pelo gás (m ²)
a	primeiro coeficiente da equação de Wiebe
a_f	coeficiente <i>f</i> das curvas polinomiais para o combustível (adimensional)
a_n	coeficiente <i>n</i> das curvas polinomiais para gases (adimensional)
B	diâmetro do cilindro (m)
C	constante de blow-by do pistão (adimensional)
C_{0W}	constante da correlação de Woschni (adimensional)
C₁	constante da correlação de Hohenberg (adimensional)
C_{1W}	constante da correlação de Woschni (adimensional)
C₂	constante da correlação de Hohenberg (adimensional)
C_{2W}	constante da correlação de Woschni (m/s.K)
C_p	calor específico a pressão constante (J/g.K)
E	energia total no sistema (J)
ETA	eficiência de conversão do combustível
eps	razão entre o curso do pistão e o comprimento da biela
f(x)	conjunto de dados de entrada no método de mínimos quadrados
f(x)'	função de entrada no método de mínimos quadrados
F_s	razão combustível-ar
H	entalpia (J)
h	entalpia específica (J/g)
hc	coeficiente de troca térmica (J/m ² .K)
k	coeficiente isoentrópico
K	constante de equilíbrio (adimensional)
l	comprimento da biela (m)
m	massa no cilindro (g ou mg)
m₁	massa inicial no cilindro (g ou mg)
M	massa molar (g/mol)
M_{mist}	massa molar da mistura (g/mol)
M_{fuel}	massa molar do combustível (g/mol)
n	segundo coeficiente da equação de Wiebe
n_R	número de revoluções do virabrequim

<i>P</i>	pressão no cilindro (MPa ou bar)
<i>P_i</i>	Pressão inicial no sistema (MPa ou bar)
<i>P_m</i>	motored pressure (MPa ou bar)
<i>Pot</i>	potência indicada (kW)
<i>Q</i>	calor transferido no sistema (J)
<i>Q_{in}</i>	calor gerado no ciclo (J)
<i>Q_{LHV}</i>	poder calorífico inferior (J/g ou MJ/kg)
<i>r</i>	razão de compressão
<i>R_u</i>	constante dos gases ideais (8,31434 J/mol.K)
<i>R</i>	constante do gás específica de um componente ou da mistura
<i>S</i>	curso do pistão (m)
<i>S</i>	entropia (J)
<i>s</i>	entropia específica (J/g)
<i>spfc</i>	consumo específico de combustível (g/kWh)
<i>spfc_{ET}</i>	consumo específico de etanol (g/kWh)
<i>spfc_{MIX}</i>	consumo específico de mistura (g/kWh)
<i>T</i>	temperatura (K)
<i>T₁</i>	temperatura inicial no sistema (K)
<i>Torque</i>	torque (N.m)
<i>U</i>	energia interna (J)
<i>u</i>	energia interna específica (J/g)
<i>V</i>	volume do cilindro (m ³ ou cm ³)
<i>v</i>	volume específico (m ³ /g ou cm ³ /g)
<i>v₁</i>	volume específico inicial da mistura (m ³ /g ou cm ³ /g)
<i>V_{BDC}</i>	volume no ponto morto inferior (m ³ ou cm ³)
<i>V_{mp}</i>	velocidade média do pistão (m/s)
<i>V_{TDC}</i>	volume no ponto morto superior (m ³ ou cm ³)
<i>W</i>	trabalho transferido no sistema (J)
<i>w</i>	trabalho específico (J/g)
<i>x</i>	fração entre gases queimados e não queimados
<i>x_b</i>	fração mássica queimada
<i>x_w</i>	fração de água no combustível
<i>y_{fuel}</i>	fração molar do combustível

y_i	fração molar da espécie i
$\Delta\theta$	duração da combustão (graus)
α	número de átomos de carbono no combustível
β	número de átomos de hidrogênio no combustível
γ	número de átomos de oxigênio no combustível
δ	número de átomos de nitrogênio no combustível
η_v	eficiência volumétrica
η_T	eficiência térmica indicada
ε	razão combustível-ar molar
μ_0	exergia do combustível (J/g)
θ	ângulo de virabrequim (graus ou radianos)
ω	velocidade de rotação (rad/s)
ϕ	razão de equivalência combustível/ar da mistura (adimensional)

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	22
1.1	Objetivo Geral	24
1.1.1	Objetivos Específicos	24
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	25
2.1	Matriz energética e Mudanças climáticas.....	25
2.2	Etanol Combustível	27
2.3	Custos relacionados à produção do álcool.....	32
2.4	Efeito da hidratação nas propriedades do etanol	34
2.5	Motor de ignição por centelha	37
2.6	Geração de poluentes em motores ciclo Otto	42
2.7	Impactos do uso de etanol super-hidratado em motores ciclo Otto	45
2.7.1	Operação e desempenho	45
2.7.2	Emissões	48
2.8	Modelagem e simulação de motores ciclo Otto.....	51
3	DESCRIÇÃO DO MODELO	57
3.1	Propriedades termodinâmicas.....	61
3.1.1	Propriedades do ar e dos produtos de combustão	61
3.1.2	Propriedades do combustível	62
3.1.3	Outras relações termodinâmicas	62
3.2	Composição inicial da mistura.....	65
3.3	Volume e massa no cilindro	69
3.4	Combustão.....	69
3.5	Temperatura de chama adiabática.....	70
3.6	Transferência de calor.....	71
3.7	Solução numérica.....	74
3.8	Composição dos produtos de combustão	77
3.9	Parâmetros de desempenho	81
3.10	Métodos numéricos e computacionais	83
3.10.1	Resolução de EDOs	84
3.10.2	Estimação de Parâmetros	84
4.	PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL	86
4.1	Motor de testes	86
4.2	Combustíveis utilizados.....	87
4.3	Módulo de injeção eletrônica.....	89
4.4.	Sistema de frenagem	90
4.5	Sistema de medição e alimentação de combustível.....	91
4.6	Medição de pressão.....	92
4.7	Medição de temperatura	94
4.8	Análise de gases	94

4.9	Sistema de aquisição de dados	97
4.9.1	Sensores de pressão, roda dentada e sonda lambda	97
4.9.2	Analizador de gases	98
4.10	Metodologia dos ensaios experimentais	99
4.10.1	Procedimento de partida, aquecimento e parada do motor.....	100
4.10.2	Ensaio de frenagem	101
4.10.3	Troca de combustíveis e medição da taxa de consumo.....	102
4.10.4	Concentração de gases de exaustão	102
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	104
5.1	Resultados experimentais: Ensaio com ponto fixo	105
5.1.1	Características de operação	105
5.1.2	Emissões	107
5.1.3	Curvas de pressão.....	107
5.2	Resultados experimentais: Ensaio MBT.....	109
5.2.1	Características de operação	109
5.2.2	Emissões	111
5.2.3	Curvas de pressão.....	111
5.3	Resultados da simulação: Ponto fixo	113
5.3.1	Parâmetros de entrada do modelo	113
5.3.2	Estimação de parâmetros	115
5.3.3	Simulação do EHC	117
5.3.4	Simulação das misturas de etanol super-hidratado	120
5.4	Simulações: MBT	125
5.4.1	Parâmetros de entrada no modelo	125
5.4.2	Estimação de parâmetros	126
5.4.3	Simulação para o EHC	127
5.4.4	Simulação das misturas de etanol super-hidratado	128
5.5	Comparação entre os resultados	131
5.5.1	Potência.....	132
5.5.2	Torque	134
5.5.3	Consumo específico de combustível	135
5.5.4	Rendimento	138
5.5.5	Emissões	140
5.5.6	Temperatura de exaustão.....	141
6.	CONCLUSÕES	143
6.1	Sugestões para trabalhos futuros	144
	REFERÊNCIAS.....	145
	Apêndice A – Coeficientes de GORDON & McBRIDE (1971) para propriedades termodinâmicas dos gases - Equações (6.1) até (6.3).....	152
	Apêndice B – Coeficientes de HEYWOOD (1988) para propriedades termodinâmicas do etanol – Equações (7.1) até (7.3).	153

Apêndice C – Coeficientes da equação de determinação das constantes de equilíbrio - Equação (67). Fonte: FERGUSON (1986). 154

Anexo A – Correlações utilizadas para cálculo da concentração de CO₂ na rotina interna do CMS-7. Fonte: MADUR (2007). 155

1 INTRODUÇÃO

A busca por fontes de energia que minimizem os impactos econômicos e ambientais sem a necessidade de mudanças severas no estilo de vida moderno tem estimulado a pesquisa e desenvolvimento de combustíveis alternativos. O uso de etanol como combustível automotivo consiste em uma tecnologia firmemente assentada no Brasil e tem fomentado muitos países a se aperfeiçoarem em sua produção para este fim. Contudo, os custos relacionados ao seu atual modelo de produção têm sido ocasionalmente apontados como uma desvantagem a sua utilização (Martinez-Frias *et al.*, 2007). Entre estes custos destaca-se o gasto energético necessário para destilação do mosto, que gera um produto final com composição aproximada de 95% em volume de etanol em água (Hira *et al.*, 2008). A formação do azeótropo torna inviável a destilação acima desta composição e o processo de desidratação posterior agrega um alto custo energético.

A utilização de etanol combustível com altas frações volumétricas de água surge como um recurso que permitiria diminuir o custo de fracionamento durante a produção do etanol. A partir de uma pesquisa bibliográfica pôde-se observar que são escassas as fontes disponíveis que investigam o desempenho de motores ciclo Otto operando com etanol hidratado que não aquele com elevada concentração (entre 95,1% e 96% em volume, conforme a Resolução ANP nº 07, de 09 de fevereiro de 2011). No decorrer deste texto, a designação etanol super-hidratado foi adotada para misturas com mais de 5% em volume de água.

Estudos pautados no uso de etanol super-hidratado geralmente se baseiam em motores HCCI ou então na combustão em reatores tubulares (Beyerlein *et. al.*, 2001; Breaux *et. al.*, 2012; Mack *et. al.*, 2009; Wang *et. al.*, 2004). Entre os resultados destes estudos que podem ser extrapolados para motores ciclo Otto citam-se a perda de eficiência térmica e o aumento do consumo específico de combustível decorrente da crescente adição de água. Em paralelo, a diminuição da temperatura de combustão e do tempo de residência da mistura na câmara, em função do avanço de ignição, podem acarretar efeitos diversos nas emissões de CO, HC e NO_x.

A avaliação experimental dos efeitos do uso de etanol super-hidratado em motores ciclo Otto é de grande valia, embora os métodos de ensaios virtuais possibilitem explorar numerosas opções (maiores do que em testes *in loco*) a um custo muito menor. Santos (2009) destaca que a avaliação de motores por simulação leva a resultados mais rápidos e menos dispendiosos e torna possível avaliar o desempenho de um combustível em condições diferentes das estabelecidas pelos dados experimentais dos ensaios.

Dentre os modelos de simulação existentes, os modelos fenomenológicos se destacam por sua relativa simplicidade e velocidade de resposta quando comparados aos modelos multidimensionais. A diferença principal entre ambos é que nos primeiros são usados correlações empíricas e semi-empíricas para descrição dos processos enquanto nos últimos são usadas técnicas iterativas para resolver as equações de conservação em volumes de controle infinitesimais no interior do cilindro. Entretanto, estas simulações exigem processadores potentes e envolvem elevados custos computacionais. Adicionalmente, os softwares comerciais muitas vezes trabalham com modelos que não estão disponíveis aos usuários (comumente chamados de softwares “*black box*” ou “*caixa preta*”), além de apresentarem custos elevados associados a licenças de uso.

Chiodi (2011, p.29) considera os modelos fenomenológicos como os mais apropriados para análise conjunta com testes de bancada nos quais maior esforço científico têm sido investido. Também destaca a capacidade de análise dos principais processos termodinâmicos que afetam a mistura no decorrer do ciclo de operação.

Uma análise das relações empíricas existentes nos modelos mostra que os coeficientes ali presentes permitem que técnicas de estimação de parâmetros sejam empregadas de modo a diminuir os erros de predição do modelo, permitindo um melhor ajuste aos dados experimentais. Por ter uma interface que contemple a modelagem, simulação e otimização e também permitir fácil interação com os dados experimentais, o *Matlab*[®] é um software adequado para este tipo de problema. Desta forma, a elaboração de um modelo acessível, de código aberto, que opere em um software de programação largamente difundido— como o *Matlab*[®] — permite criar uma ferramenta útil para uso em estudos futuros.

1.1 Objetivo Geral

Elaborar um modelo matemático que avalie a operação e o desempenho de um motor de combustão interna utilizando diferentes combustíveis: etanol hidratado combustível (EHC) e misturas de álcool e água nas proporções de 90% (E90W10), 80% (E80W20), 70% (E70W30) e 60% (E60W40) em volume de etanol.

1.1.1 Objetivos Específicos

- Simular a variação de pressão e temperatura dos gases no interior do cilindro;
- Simular o trabalho gerado, o calor transferido, a potência indicada, o torque indicado, o consumo específico de combustível e o rendimento de conversão do combustível;
- Verificar as emissões dos gases de exaustão, sendo: CO₂ (% volume), CO (ppm), NO₂ (ppm) e HC (% volume);
- Comparar o desempenho do motor com os diferentes combustíveis;

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Matriz energética e Mudanças climáticas

O uso de combustíveis fósseis figura entre as principais causas que guiaram a humanidade a estabelecer o chamado “padrão de vida” moderno, e tem sido a base fundamental para a manutenção do mesmo. A geração de energia elétrica, no âmbito global, é fortemente dependente do consumo de carvão, gás natural e da queima de derivados do petróleo. Da mesma forma, conforme os países emergentes atingem maiores graus de desenvolvimento, exigem acesso seguro e crescente a recursos de energia elétrica e transporte. No que concerne à geração elétrica o Brasil é exceção à regra, visto que 74,9% de sua oferta interna de energia elétrica provêm do setor hidrelétrico (Balanço Energético Nacional, 2011, p. 20). Contudo, o consumo energético no setor de transporte encontra-se predominantemente assentado no uso de derivados líquidos do petróleo, como a gasolina e o óleo Diesel. A Figura 1 mostra a produção e consumo mundial de petróleo ao longo dos últimos dez anos, obtidos na *British Petroleum Statistical Review* (BP, 2012, p. 9-10).

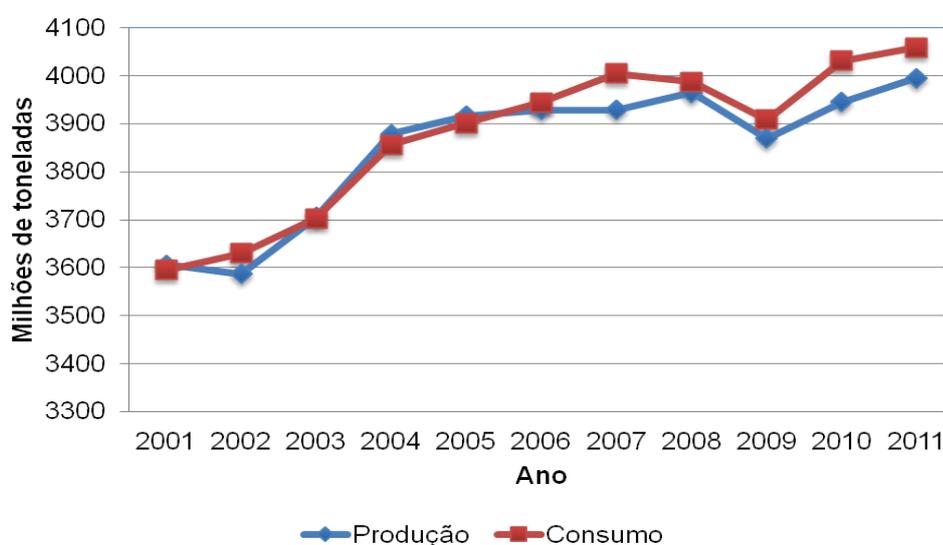


Figura 1 - Produção e consumo mundial de petróleo no período 2001-2011 (BP, [2012], p. 9-10).

O gráfico da Figura 1 mostra como a produção global de petróleo acompanha de perto o consumo global (este maior que aquele devido à variação de estoques de barril). Um estudo da *U.S. Energy Information Administration* (2011, p. 2-3), sugere um aumento de 53% no consumo de energia entre os anos de 2008 e 2035, ano no qual é previsto uma expressiva participação de 80% dos combustíveis fósseis na matriz energética. Devido à natureza limitada dos combustíveis fósseis, fruto de milhões de anos de transformação da matéria orgânica, o consumo crescente ou mesmo constante eventualmente irá exceder a produção, podendo levar inclusive à escassez. Cenários semelhantes são projetados para o carvão e o gás natural. Baseando-se nestas previsões, torna-se clara a necessidade de desenvolver combustíveis alternativos antes do período de carência dos recursos convencionais.

O fato de os combustíveis fósseis serem um recurso finito não é a única característica que estimula a busca por fontes alternativas. O relatório *Climate Change 2007: Synthesis Report* (IPCC, 2007) apresentou uma avaliação das principais mudanças climáticas e suas causas do período compreendido entre 1850 e 2005. Os resultados mostraram que a temperatura média global aumentou a taxa de 0,13°C por década entre 1956 e 2005, o nível dos mares subiram 1,8 mm por ano entre 1961 e 2003 e a cobertura polar do Mar Ártico encolheu 2,7% por década de 1978 a 2005. A razão destas mudanças é atribuída às modificações na concentração atmosférica de Gases de Efeito Estufa (GEEs) que geram alterações no balanço de energia climático, visto que a taxa de emissão tem superado a taxa de remoção dos mesmos da atmosfera. As atividades humanas resultam em emissões de quatro principais de GEEs de longa vida: dióxido de carbono (CO₂), metano (CH₄), óxido nitroso (N₂O) e halocarbonos (grupo de gases contendo flúor, cloro ou bromo). Entre 1970 e 2004, as emissões globais destes gases aumentaram 70%, sendo a maior parcela devido ao CO₂ decorrente da queima de combustíveis fósseis, sendo de 56,6% em 2004 (IPCC, 2007). Dentre os sistemas de combustão que geram estes poluentes predominam os motores de combustão interna, que estão entre os maiores causadores da poluição urbana.

Em conjunto com o CO₂, os principais poluentes de interesse no caso de motores de ignição por centelha operando com combustíveis fósseis são os óxidos de nitrogênio (NO e NO₂), o monóxido de carbono (CO), os hidrocarbonetos não queimados (HC) e compostos orgânicos como benzeno, acetaldeído, formaldeído e

1,3-butadieno (Hochgreb, 1998, p. 119). O CO é uma substância altamente tóxica até mesmo em baixas proporções. Quando combinado com a hemoglobina presente no sangue, reduz drasticamente a capacidade de transporte do oxigênio para as células, podendo ocasionar a morte de humanos e animais (Mcallister, 2011, p. 177). Paralelamente, o fenômeno de *smog*, comum nos grandes centros urbanos, ocorre como resultado de interações fotoquímicas entre os hidrocarbonetos não queimados e o NO_x, resultando em maiores níveis de ozônio e outros oxidantes na troposfera (Heywood, 1998, p. 4). Dentre os orgânicos, os aldeídos se destacam por serem classificados como potenciais agentes carcinogênicos pela *U.S. Environmental Protection Agency* (EPA, 2007).

Em muitos países, a emissão de poluentes por motores veiculares sobrepõe-se a queima de carvão como principal preocupação. Um estudo da *European Environment Agency* demonstra que o transporte rodoviário na Europa é responsável por 68,9% das emissões de CO e 62,9% das emissões de NO_x (EEA, 2008). Embora os padrões de emissões da própria EEA estabeleçam limites cada vez mais restritivos, os esforços para reduzir as emissões de veículos individuais estão em risco de serem ultrapassados pelo aumento no volume do tráfego. Somente no período 2011-2012 o aumento na produção mundial de veículos foi de 5,3% segundo a *Organisation Internationale des Constructeurs d'Automobiles* (OICA, 2012).

2.2 Etanol Combustível

Dentre os combustíveis automotivos, o etanol possui inúmeras propriedades que sugerem que a sua combustão resulta em reduções significativas nas emissões de poluentes veiculares. O etanol não contém olefinas, compostos aromáticos e enxofre, que estão presentes na gasolina e no óleo Diesel e possuem impacto negativo na qualidade do ar. No Brasil, o etanol tem sido utilizado na forma de etanol anidro combustível (EAC), com teor alcoólico mínimo de 99,6 % em volume, para ser usado na formulação da gasolina tipo C, e como etanol hidratado combustível (EHC) destinado à venda em postos, com teor entre 95,1% e 96% em volume (Resolução

ANP nº 7, 2011). Na gasolina tipo C, o EAC constitui um aditivo oxigenado que permite uma combustão mais completa, diminuindo o teor de hidrocarbonetos não queimados, NO_x e benzeno na exaustão de motores (Zvirin *et al.*, 1998, p. 606). A Tabela 1 permite comparar as propriedades do etanol com a gasolina e com o Diesel, a fim de observar o seu impacto no uso para fins carburantes.

Tabela 1 - Comparação de propriedades do etanol, gasolina e Diesel.

Propriedade	Etanol Anidro	Gasolina	Diesel
<i>Fórmula</i>	<i>CH₃CH₂OH</i>	<i>C₄ - C₁₂</i>	<i>C₈ - C₂₀</i>
C, % massa	52,14	85 - 88	85 - 88
H, % massa	13,13	12 - 15	12 - 15
O, % massa	34,73	-	-
Densidade, g/cm ³ (20°C/4°C)	0,7893	0,69 - 0,8	0,82 - 0,86
Calor latente de vaporização, MJ/kg (20°C)	0,839	0,349	0,256
Poder Calorífico Inferior, MJ/L (20°C)	21,09	32,16	35,4
Ponto de Fulgor, °C	12,8	-43 a -39	52 - 96
Razão ar/combustível estequiométrica, % massa	8,97	14,7	14,5
Limites de inflamabilidade, % volume em ar	4,3 - 19	1,4 - 7,6	1 - 5
Número de Octanas (equivalente)	92	80 - 88	-
Número de Cetanas (equivalente)	8	8 - 14	40 - 60
Pressão de Vapor, kPa (38°C)	16	48 - 103	-

Fonte: *Biomass for Renewable Energy, Fuels and Chemicals* (Klass, 1998, p. 392).

Entre as vantagens do etanol encontra-se o fato de ser produzido a partir de um recurso renovável (biomassa), estar mais uniformemente distribuído no mundo, podendo ser produzido localmente, e ter potencial para diminuir significativamente as emissões de CO₂ quando seu ciclo de vida completo é levado em consideração (Bailey, 1996, p. 37). Em termos de operação do motor, o maior número de octanos

do etanol em relação à gasolina lhe confere excelentes propriedades antidetonantes. Esta característica permite o uso de maiores razões de compressão, com incrementos entre 6% e 10% na eficiência térmica teórica de motores ciclo Otto (Bailey, 1996, p. 45). Por outro lado, a elevada octanagem implica em um baixo número de cetanos, o que dificulta o uso de etanol em motores Diesel.

Por ter um calor latente de vaporização consideravelmente maior que o da gasolina, o etanol tende a não evaporar completamente durante a fase de admissão no cilindro, continuando a evaporar durante a fase de compressão. Desta maneira, para uma mesma fração de combustível evaporado (em relação à gasolina) o resfriamento e a quantidade de ar admitido na câmara de combustão são maiores. Assim, a temperatura diminui e a densidade da mistura ar-combustível aumenta, promovendo um aumento da eficiência volumétrica (Klass, 1998, p. 393; Zvirin *et al.*, 1998, p. 604). Paralelamente, o maior intervalo entre os limites de inflamabilidade do etanol amplia a faixa da razão ar-combustível na qual o motor pode operar.

Por outro lado, entre as desvantagens mais observadas no uso de etanol combustível em motores citam-se:

- O poder calorífico do etanol é consideravelmente menor que da gasolina e do Diesel. Portanto, uma quantidade maior de combustível é necessária para suprir o motor com uma mesma quantidade de energia ou, em outros termos, o consumo específico de combustível tende a ser maior;
- A baixa pressão de vapor do etanol, em conjunto com o elevado ponto de fulgor (menor temperatura na qual um combustível liberta vapor em quantidade suficiente para formar uma mistura inflamável), dificulta a partida de motores em baixas temperaturas, sendo necessário um sistema de partida a frio em temperaturas menores que 13°C (Sales *et al.*, 2012, p. 190);
- O uso de etanol resulta em aumento nas emissões de formaldeído e acetaldeído (Zvirin *et al.*, 1998, p. 604-606). Além de serem nocivos por si só, estes componentes aceleram a formação de poluentes secundários, como os radicais hidroperoxila (HO_2), peroximetil (CH_3OO) e o nitrato de peroxiacetil ($\text{CH}_3=\text{OO}_2\text{NO}_2$) (Tanner *et al.*, 1988, p. 1027).

Costa *et al.* (2009) compararam o desempenho e as emissões de um motor ciclo Otto operando com etanol hidratado em comparação com a gasolina tipo C

(com 22% em volume de etanol anidro) evidenciando um aumento na eficiência térmica quando da operação com etanol hidratado, justificado pelo curto período de queima associado ao maior avanço de ignição (Figura 2). O etanol hidratado produziu emissões maiores de CO₂ e menores de CO em comparação com a gasolina tipo C (Figura 3).

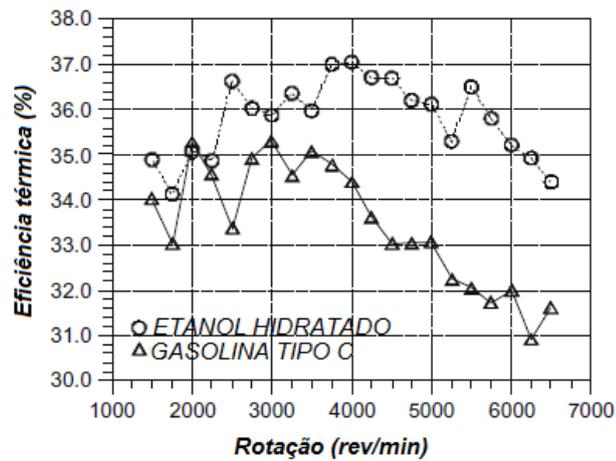


Figura 2 - Ponto de ignição em graus antes do PMS (*degrees before top dead center*, °BTDC) e eficiência térmica etanol hidratado em comparação com a gasolina tipo C. Fonte: Costa *et al.* (2009, p. 290-292).

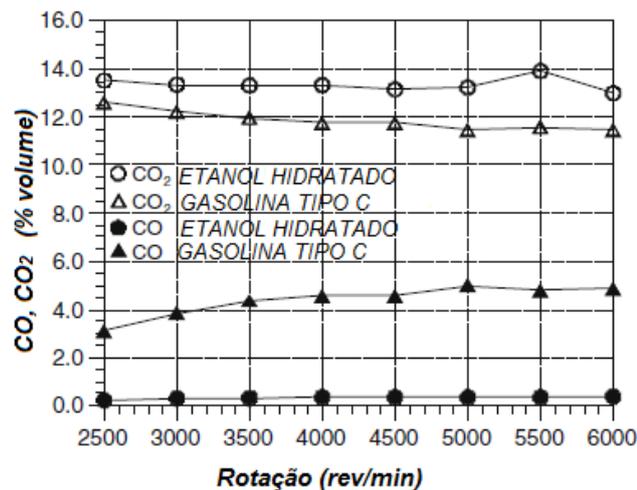


Figura 3 - Emissões do etanol hidratado em comparação com a gasolina tipo C. Fonte: Costa *et al.* (2009, p. 290-292).

Na década de 1980 o etanol foi o combustível mais utilizado em veículos de passeio, perdendo esse posto devido a uma crise de desabastecimento em 1989 e à

queda dos preços internacionais do petróleo. No ano de 2008 seu consumo ultrapassou novamente a gasolina, porém foi superado mais uma vez em 2010, conforme mostra a Figura 4.

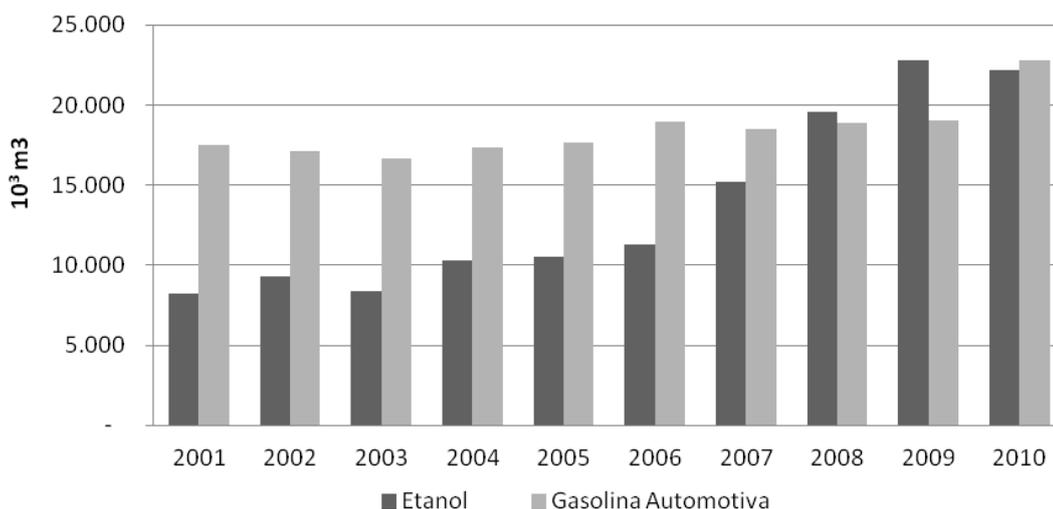


Figura 4 - Vendas de etanol¹ e gasolina automotiva² no Brasil - 2001-2010. Fonte: ANP (2011).

¹Inclui as vendas de etanol hidratado e de etanol anidro misturado na gasolina C.

²Inclui apenas a gasolina A. Exclui o etanol anidro misturado à gasolina C.

As características singulares do etanol têm estimulado muitos países a se aperfeiçoarem em sua produção para fins carburantes, notadamente os Estados Unidos e o Brasil, responsáveis por mais de 86% da produção mundial em 2010 (Boundy *et al.*, 2011). Outras regiões também pretendem ampliar a produção ou a participação dos biocombustíveis em sua matriz energética, como a Europa, Ásia e Austrália (Sorda *et al.*, 2010, 6982-6986).

No ano de 2011 o número de veículos *flex fuel* fabricados no Brasil corresponderam a 74,3% da produção nacional, existindo 14,5 milhões de unidades fabricadas desde 2003 (ANFAVEA, 2012, p. 61), quando o modelo foi lançado no mercado brasileiro. Esta flexibilidade possibilitou aos consumidores escolher qual combustível utilizar em função do preço. Desta forma, o etanol tem aumentado progressivamente sua importância como combustível, sendo o crescimento da venda de veículos *flex fuel* a principal razão do aumento em sua demanda (Freitas *et al.*, 2011, p. 1146).

2.3 Custos relacionados à produção do álcool

A cana-de-açúcar é a base da produção do etanol brasileiro, que nas usinas têm início com a limpeza e moagem da cana, quando o caldo é separado do bagaço. O caldo segue para etapa de fermentação onde é gerado o mosto, composto majoritariamente por etanol, e água. Como o ponto de ebulição do etanol (78°C) é consideravelmente menor que da água (100°C), sua separação é realizada mediante a destilação. Após o fracionamento da mistura na coluna, o vapor do etanol separado é então condensado e o processo é repetido até a obtenção da máxima concentração de etanol no produto de topo. A formação de mistura azeotrópica limita esta concentração a um valor aproximado de 95% em volume de etanol em água (Hira *et al.*, 2008, p. 2451). O etanol hidratado efluente da torre pode ser armazenado para uso na síntese do EHC comercial ou então desidratado para produção de etanol anidro.

As etapas de destilação e de desidratação se destacam como os principais pontos relacionados aos custos de produção. Mesmo em casos em que o etanol hidratado é o produto final, percebe-se que para a obtenção de graus de pureza acima de 80% em volume de etanol o custo energético da destilação em relação ao PCI do etanol, até então linear, torna-se exponencial, como mostrado na Figura 5 (Saxena *et al.*, 2012, p. 449).

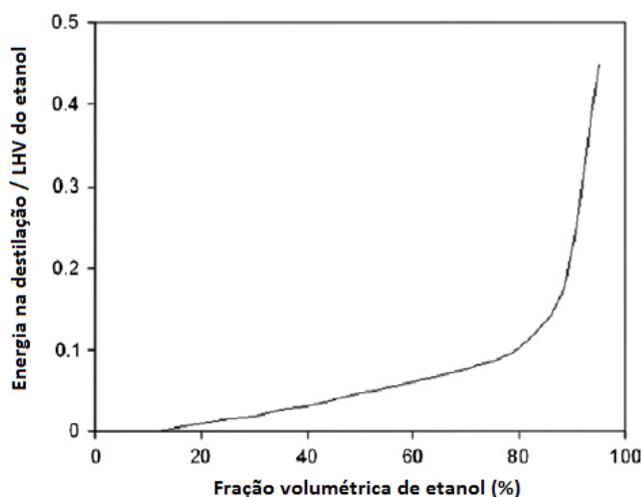


Figura 5 - Razão entre a energia necessária para destilação do etanol e o poder calorífico inferior do produto (*Lower Heating Value*). Fonte: Saxena *et al.*, 2012, p. 449.

Em muitos países, os altos custos relacionados à obtenção do etanol são apontados como indícios de inviabilidade econômica. Martinez-frias *et al.* (2007, p. 332) afirmaram que nos Estados Unidos a produção de etanol é frequentemente considerada dependente de subsídios do governo para ser competitiva, além de afirmar que as vantagens energéticas advindas da produção e uso de etanol de milho são pequenas. Através de um balanço de energia para produção de etanol de milho, incluindo os coprodutos gerados (óleo e amido de milho), pôde-se perceber que a destilação corresponde a 23% do custo energético total, somando 37% quando a desidratação é necessária para conversão do etanol hidratado em anidro. Para outras matérias-primas, a fração do custo energético relacionado à destilação costuma variar pouco. Tomando como exemplo a mandioca, Salla *et al.* (2010, p. 447) demonstraram que a destilação do mosto fermentado para produção de etanol corresponde a 41,26% do dispêndio energético relacionado ao processamento industrial da mandioca.

Uma possibilidade para aumentar o saldo energético do etanol consiste no desenvolvimento de novas técnicas que o tornem utilizável mediante custos energéticos menores. O uso de etanol hidratado por si só constitui uma maneira de eliminar dispendiosos processos de desidratação. Desta forma, embora muitas aplicações exijam o uso de etanol anidro, encontrar aplicações práticas para o etanol hidratado pode tornar o balanço energético do etanol muito mais atrativo. Do mesmo modo, como mostra a Figura 5, um retorno energético ainda maior pode ser obtido com a utilização de etanol com altas frações volumétricas de água.

Mack *et al.* (2009) fazem uma comparação entre o custo energético associado a produção de etanol anidro e da mistura de 35% em volume de etanol em água. A Figura 6 mostra o consumo energético relativo a todos os estágios de produção do etanol de milho como uma porcentagem do poder calorífico do etanol e dos coprodutos.

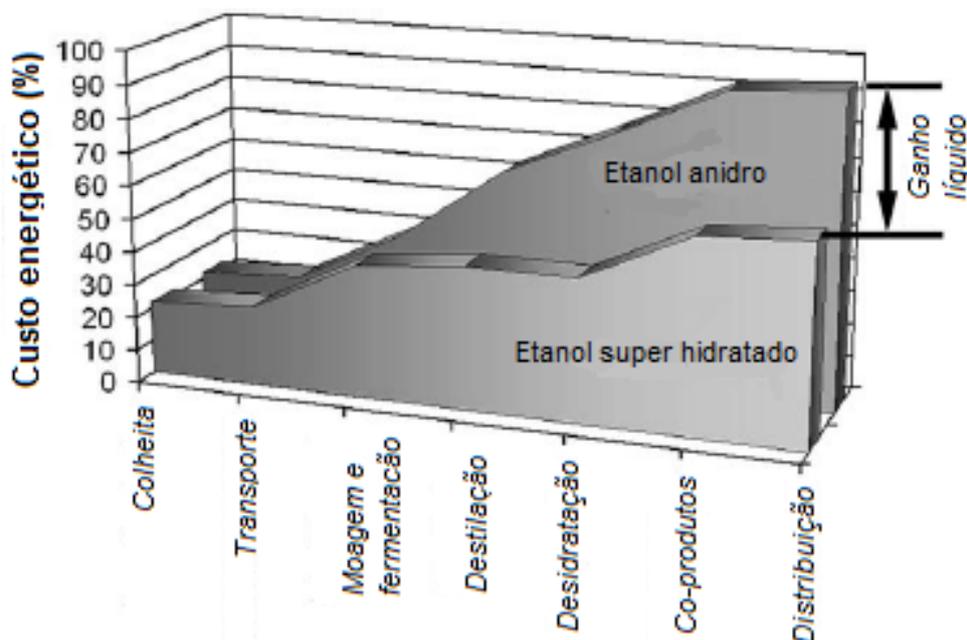


Figura 6 - Comparação do custo energético do etanol anidro e do etanol super hidratado com composição de 35% em volume. Fonte: Mack *et al.* (2009, p. 783).

A diluição de etanol com 65% em volume de água provavelmente tornaria seu uso de difícil aplicação (Breux, 2009, p. 22). No entanto, é possível operar com graus de hidratação mais moderados que resultem em uma funcionalidade razoável e tenham potencial para reduzir substancialmente o custo da produção de etanol. Como exemplo, Ladisch *et al.* (1979) indicaram que a utilização de misturas com 80% em volume de etanol exigiriam cerca de um quarto da energia da que seria necessária para alcançar a destilação de etanol a 95% em volume. É neste contexto que o uso de etanol super-hidratado surge como uma alternativa na redução dos custos associados à produção do etanol.

2.4 Efeito da hidratação nas propriedades do etanol

O conhecimento do comportamento das propriedades físico-químicas de misturas combustíveis contendo água fornece subsídios para prever seu comportamento durante a combustão. Rajan *et al.* (1982) investigaram as

características calorimétricas e de miscibilidade entre misturas de etanol, água e gasolina. O estudo demonstrou que é possível misturar estes componentes de forma a obter misturas estáveis e detectou um limite para quantidade de gasolina adicionada na mistura como função do teor de água presente no álcool (para misturas de etanol hidratado com 6% em volume de água a fração de água na mistura com gasolina não pode ultrapassar 1,4% em volume). A existência deste limite se deve ao fato da mistura binária de gasolina e água ocasionar a formação de duas fases imiscíveis, pois a primeira é um composto apolar (com pares de elétrons igualmente distribuídos na molécula) enquanto a segunda é um composto polar (com distribuição desigual dos pares eletrônicos na molécula).

Por outro lado, o etanol é uma molécula fracamente polar que apresenta um ângulo de ligação de 105° entre o carbono central e o radical OH. Este ângulo é semelhante em módulo ao apresentado pela molécula de água (109°), que também é uma substância polar (Figura 7). Estas similaridades permitem que o álcool e a água sejam miscíveis em todas as proporções, de forma que reações de combustão em fase líquida e gasosa sejam possíveis com esta mistura (Steciak *et al.*, 2001). Entretanto, a formação desta mistura não mantém as propriedades do combustível inalteradas. A contínua hidratação do etanol acarreta uma redução no poder calorífico do combustível, consequência da crescente fração de energia correspondente ao calor latente de vaporização da água. Esta relação é indicada por Breaux *et al.* (2011) conforme mostra a Figura 8.

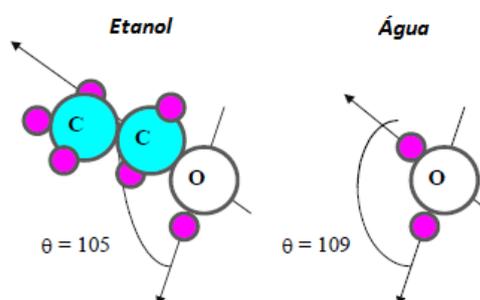


Figura 7 - Ângulos de ligação entre moléculas de etanol e água. Fonte: Steciak *et al.* (2001).

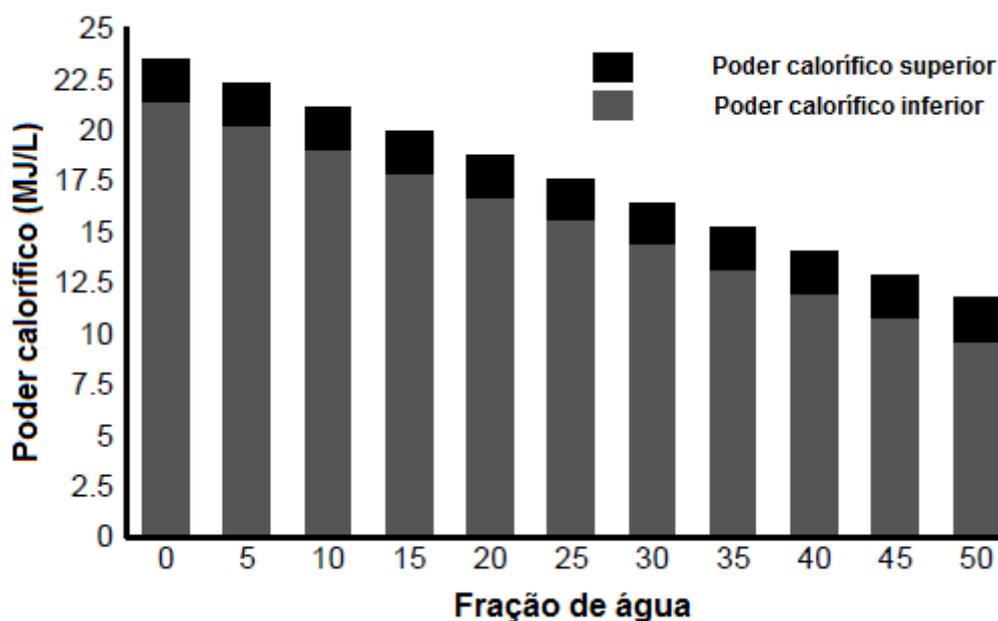


Figura 8 - Efeito da fração de água no poder calorífico do etanol. Fonte: Breaux *et al.* (2011)

Estimativas dos efeitos da adição de água sobre as propriedades do etanol podem ser feitas a partir das relações entre propriedades de misturas. A pressão de vapor da água a 38°C é de 6,63 KPa (Perry, 1999, cap. 2, p. 49), sendo consideravelmente menor que a do etanol puro (16 KPa a 38°C). Assim, pela lei de Raoult, a pressão de vapor da mistura de etanol e água tende a diminuir conforme a fração molar de água aumenta. Este decréscimo na volatilidade pode acarretar diminuição nas emissões evaporativas em tanques de armazenamento de combustível. Entretanto, a mesma relação é válida para o ponto de fulgor, acentuando ainda mais os problemas de partida a frio do etanol.

O calor latente de vaporização e o volume específico são propriedades que podem ser destacadas devido a sua influência na combustão. A mudança de fase da água exige 2,26 MJ/kg a 100°C (Couper *et al.*, 2005, p. 731), que representa cerca de 250% a mais do que a energia necessária para vaporizar o etanol (0,839 MJ/kg). Desta informação é possível deduzir que a temperatura de combustão tende a ser menor, visto que uma fração da energia é direcionada à mudança de fase da mistura. Adicionalmente, o calor de vaporização requerido pela água aumentaria a resistência à detonação do combustível. Por outro lado, para uma mesma temperatura e pressão, o volume específico da água no estado gasoso é maior do que do etanol e do CO₂, que é um dos principais produtos da combustão. Isto pode

ser inferido a partir da lei dos gases ideais - $PV = \frac{RT}{M}$ – onde v é o volume específico e M a massa molar do gás (menor para água, o que explica seu menor volume específico nas mesmas condições). Esta característica representa uma maior expansão volumétrica da água no estado gasoso, o que é conveniente durante a fase de expansão dos gases no cilindro de um motor.

2.5 Motor de ignição por centelha

O propósito de um motor de combustão interna consiste na conversão da energia química de um combustível em energia mecânica mediante a expansão de uma fronteira móvel. O motor de ignição por centelha, também chamado motor ciclo Otto e o motor de ignição por compressão, ou ciclo Diesel, são os motores de combustão interna mais difundidos ao redor do mundo. Devido à simplicidade, robustez e alta razão potência-peso, estes dois tipos de motores são largamente utilizados para transporte e geração de potência (Heywood, 1988, p. 1). Em ambos, a fronteira móvel é constituída por um pistão que se movimenta alternativamente no interior de um cilindro, no qual o pistão, a biela e o virabrequim são elementos que podem ser representados pelo mecanismo mostrado na Figura 9. A conexão entre a biela e o virabrequim é o mecanismo que permite converter o movimento linear do pistão em movimento circular contínuo.

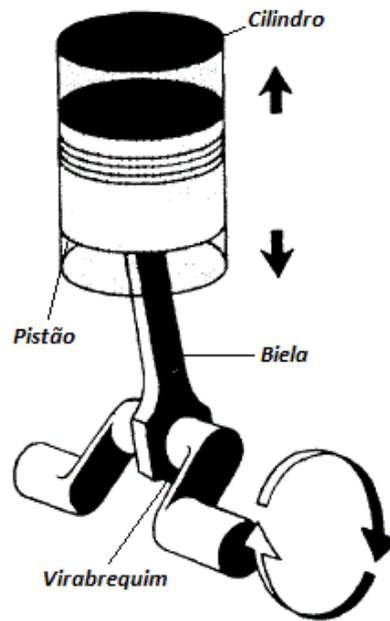


Figura 9 - Elementos básicos de um motor de combustão interna ciclo Otto e ciclo Diesel.
Adaptado de www.tpub.com (acessado em 07/11/2012).

A rotação do virabrequim é decorrência do movimento cíclico do pistão, que oscila entre o ponto morto superior (PMS) e o ponto morto inferior (PMI), nos quais o volume do cilindro corresponde ao mínimo e ao máximo, respectivamente. O volume mínimo do cilindro é denominado *câmara de combustão*, e a diferença entre o volume máximo do cilindro e o volume de folga é denominado *volume deslocado* (Figura 10). A razão entre o volume máximo do cilindro e o volume mínimo é a *razão de compressão*, que possui valores típicos variando entre 8 e 12 para motores ciclo Otto (Heywood, 1988, p. 10). Pela Figura 10 também se percebe que cada posição assumida pelo pistão pode ser relacionada a um determinado ângulo do virabrequim e vice-versa.

Como a sequência de eventos que culmina em um ciclo de operação no cilindro necessita de quatro deslocamentos do pistão – correspondente a duas revoluções do virabrequim – o ciclo de operação tanto de motores ciclo Otto quanto de motores ciclo Diesel é chamado *ciclo de quatro tempos* (Figura 11).

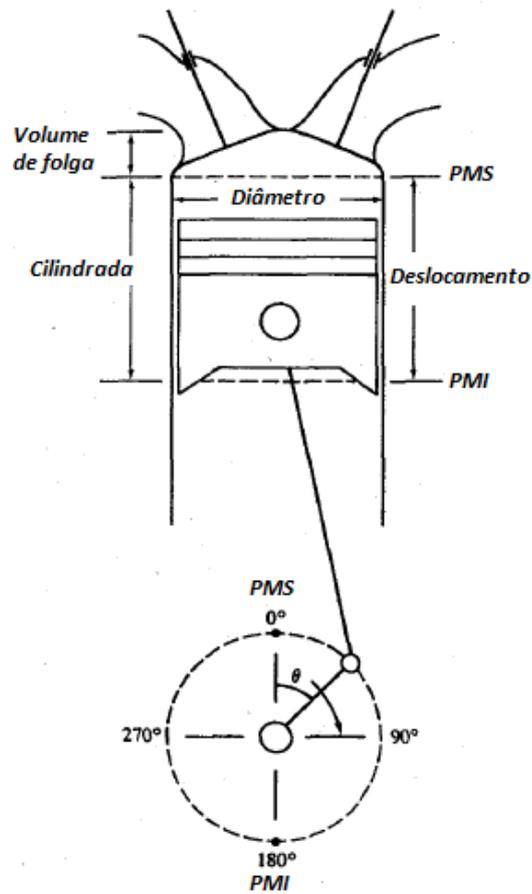


Figura 10 - Geometria básica de um motor de combustão interna recíproco. Adaptado de Heywood, 1988, p. 9.

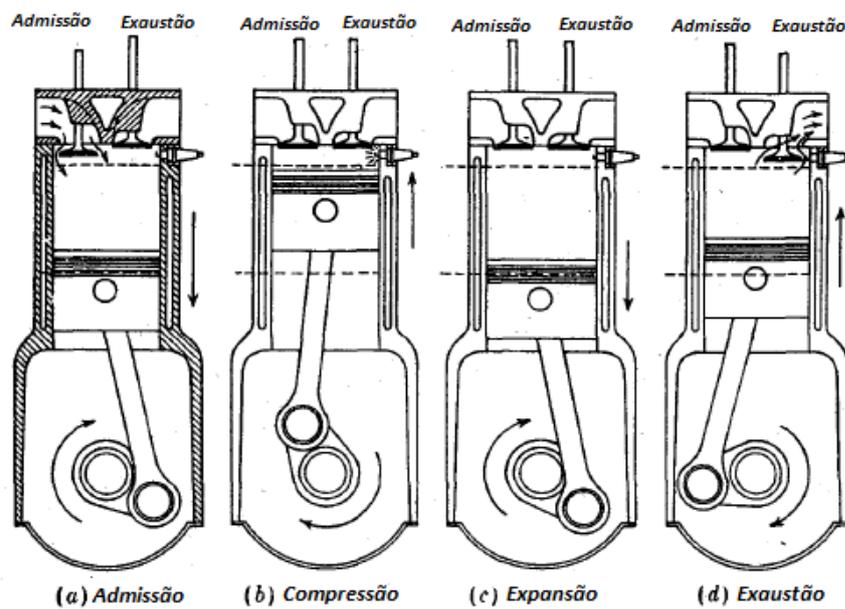


Figura 11 - Ciclo de operações de quatro tempos. Adaptado de Heywood, 1988, p. 10.

As etapas do ciclo de quatro tempos são as seguintes:

- a) *Fase de admissão* – Têm início nas vizinhanças do PMS e termina próximo ao PMI. Etapa na qual a mistura ar-combustível entra no cilindro;
- b) *Fase de compressão* – Inicia após a mistura ser admitida e as válvulas se fecharem. A mistura é comprimida a uma fração do volume inicial, e no final do ciclo a combustão inicia, elevando rapidamente a pressão interna no cilindro;
- c) *Fase de expansão* – Os gases de combustão, sob alta temperatura e pressão, forçam o pistão para baixo e promovem a rotação do virabrequim. Também é chamado de ciclo motor, pois é nele que efetivamente o trabalho é gerado.
- d) *Fase de escapamento* – Fase na qual os gases de combustão são expulsos do cilindro pela abertura das válvulas de exaustão, decorrente da diferença entre a pressão interna e externa e ao movimento ascensional do pistão, que força a saída dos gases.

A sequência de eventos que tipicamente ocorre em um motor de ignição por centelha é mostrada na Figura 12, onde variáveis de interesse são plotadas em função do ângulo de virabrequim (CAD, do inglês *crank angle degree*). O CAD é uma variável independente útil, pois os processos que ocorrem em motores ocupam intervalos aproximadamente constantes de ângulo em uma ampla faixa de rotações. Costuma-se assumir que a mistura ar-combustível já se encontra totalmente homogeneizada no momento da admissão em um motor ciclo Otto (o que não ocorre para motores ciclo Diesel). Da mesma forma, no momento da admissão a mistura ar-combustível se combina com os gases residuais remanescentes do ciclo anterior. Após a válvula de admissão se fechar, o conteúdo do cilindro é comprimido a pressões e temperaturas acima dos valores atmosféricos, de forma que ocorre transferência de calor para o pistão, cabeçote e as paredes do cilindro. Contudo, o efeito desta transferência sobre as propriedades dos gases não queimados pode ser considerado desprezível (Heywood, 1988, p. 17).

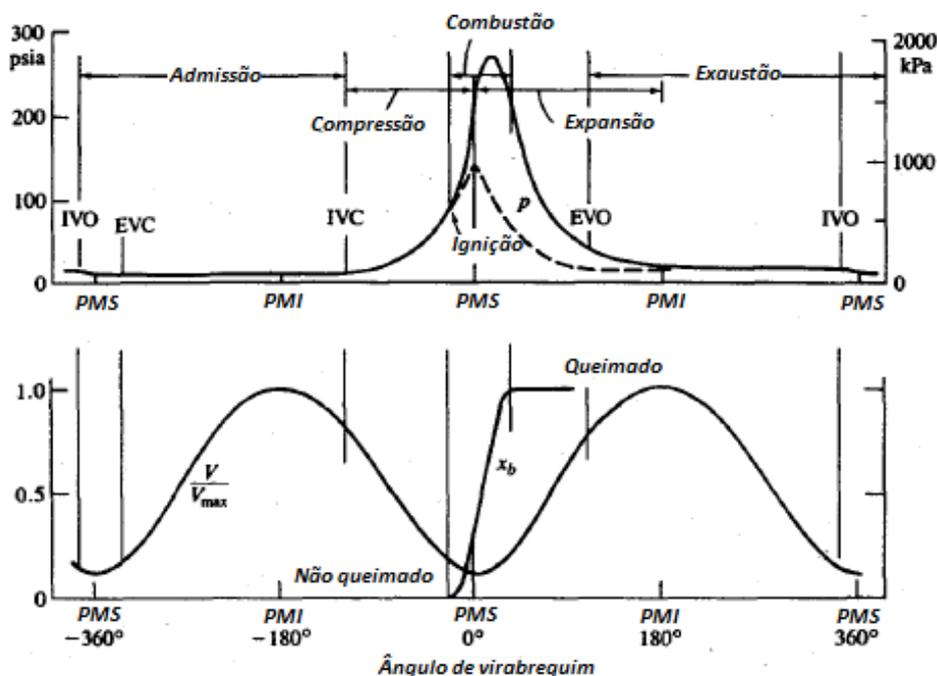


Figura 12 - Sequência de eventos no ciclo de operações de um motor SI. A pressão no cilindro é denotada por p ; o volume por V/V_{\max} ; e a fração de mistura queimada por x_b . IVO/IVC – válvula de admissão aberta/fechada; EVO/EVC – válvula de exaustão aberta/fechada. Adaptado de Heywood, 1988, p. 18.

Entre 10° e 40° antes do PMS uma faísca produzida entre os eletrodos da vela de ignição dá início ao processo de combustão, de forma que uma chama turbulenta se propaga através da mistura de ar, combustível e gases residuais e se extingue quando em contato com as paredes do cilindro. A duração da combustão varia de acordo com o projeto e a operação do motor, mas tipicamente se situa no intervalo entre 40° e 60° (Heywood, 1988, p. 18).

Com o início da combustão, a pressão no cilindro se eleva a níveis maiores do que seria se apenas o ciclo de compressão ocorresse isoladamente (representado pela linha pontilhada na Figura 12). Devido a variações na quantidade e na composição da mistura introduzida no cilindro, bem como no teor de gases residuais, o formato da curva de pressão versus CAD não é exatamente o mesmo no decorrer de cada ciclo.

Existe um tempo ótimo de ignição que, para uma dada massa de ar e combustível dentro do cilindro, oferece o valor de torque máximo. Este tempo é denominado *maximum brake-torque (MBT) timing*. A presença de gases residuais, a diluição da mistura ar-combustível e o aumento de rotação provocam maior atraso da ignição e menor velocidade de queima da mistura, de modo que geralmente é

necessário avançar o ângulo de ignição, ou seja, adiantar o CAD no qual a faísca ocorre na vela, de forma que o valor do torque se situe o mais próximo possível do ótimo.

Aproximadamente após 65% do percurso de expansão, a válvula de escape começa a abrir (Heywood, 1988, p. 19). Como a pressão no cilindro é bem maior que aquela no coletor de escape, ocorre um processo de purga dos gases de combustão. As válvulas de admissão e exaustão são abertas e fechadas lentamente para evitar ruído e desgaste, de modo que a válvula de escape permanece aberta até pouco depois do PMS, enquanto a válvula de admissão começa a abrir um pouco antes do PMS (período de cruzamento de válvulas).

Os motores de ignição por centelha podem ser monocilíndricos ou multicilíndricos, que podem ser dispostos em diferentes configurações geométricas. Os tamanhos destes motores variam desde pequenos motores de aeromodelos, que desenvolvem uma potência aproximada de 100W, até grandes motores estacionários multicilindros que produzem milhares de kW por cilindro (Pulkrabek, 1997, p. 2).

2.6 Geração de poluentes em motores ciclo Otto

Os motores ciclo Otto tem contribuição especial nas emissões de monóxido de carbono (CO), hidrocarbonetos intermediários (HC) e de óxidos de nitrogênio (NO_x, referente ao teor total de NO e NO₂). A temperatura e o tempo de residência são dois importantes parâmetros que influenciam na formação de poluentes em motores. A temperatura determina o aparecimento de determinadas reações que culminam na formação de espécies químicas específicas. Por ser fortemente dependente da proporção da mistura entre ar, combustível e gases residuais, a temperatura de combustão pode ser controlada a partir da composição da mistura reagente. Paralelamente, a fim de completar a reação a mistura deve permanecer no cilindro durante um período suficiente para reagir. Este tempo de residência é inversamente proporcional à taxa de reação (que, por sua vez, também depende da temperatura e composição) e possui valores na ordem de milissegundos (Mcallister

et al., 2011, p. 179). Desta afirmação, deduz-se que a velocidade de rotação do motor, juntamente com a razão ar-combustível da mistura, são dois parâmetros que têm influência direta na geração de poluentes.

De modo geral, a geração de CO resulta da oxidação incompleta do combustível em CO₂. Em misturas ricas (baixa razão ar-combustível) uma considerável quantidade de CO permanece sem reagir devido às baixas temperaturas e ao baixo nível de O₂ na mistura. Por outro lado, em misturas pobres (alta razão ar-combustível), existe um montante de CO não queimado devido às baixas temperaturas decorrente das perdas térmicas para o ar em excesso. Assim, quanto mais próximo da proporção estequiométrica, melhor é a eficiência da combustão, o que ocasiona níveis menores de CO na exaustão. Adicionalmente, outras condições podem contribuir para geração de CO, como a dissociação do CO₂ devido às altas temperaturas e pressões no cilindro (Milton, 1998, p. 195).

A maior contribuição para as emissões de HC resulta da presença de fendas e passagens estreitas na câmara de combustão onde a chama não pode se propagar. Nestes pontos ocorre a formação de depósitos, a absorção de combustível pela camada de óleo lubrificante e a vaporização incompleta, que atuam como fontes de HC durante o processo de combustão. Após a passagem da chama, especialmente durante a fase de expansão, os hidrocarbonetos não queimados emergem a partir destas fontes e são parcialmente oxidados na mistura de gás queimado. Uma fração do HC restante é retida no interior do cilindro, enquanto que o restante sai do cilindro do motor como gases de escape (Hochgreb, 1998, p. 137).

A formação de NO_x se origina quando as colisões entre átomos de oxigênio e moléculas de N₂ no cilindro se tornam significativamente vigorosas a ponto de quebrar as ligações N-N. Sendo assim, as variáveis críticas na formação de NO_x são a temperatura máxima do gás e a concentração de oxigênio na câmara. A formação de NO_x é especialmente potencializada em motores de ignição por centelha devido à combinação entre combustão e compressão do gás, característica inerente do ciclo Otto (Heywood, 1998, p. 9). Parte dos gases de escape podem ser recirculados para o cilindro, atuando como um diluente da carga, uma estratégia que tem sido comumente utilizada para controle da geração de NO_x. Isto é feito tanto de maneira passiva (através da eliminação incompleta do gás queimado) ou por meio de recirculação ativa através de uma válvula de controle EGR (*Exhaust Gas*

Recirculation). A elevada capacidade calorífica dos gases de escape, em especial o CO₂ e H₂O, reduz significativamente a temperatura de pico no cilindro, retardando o processo de formação de NO (Hochgreb, 1998, p. 132).

O 1º Inventário Nacional de Emissões Atmosféricas por Veículos Automotores Rodoviários (Ministério do Meio Ambiente, 2011) apresenta os fatores de emissão para automóveis e veículos comerciais leves movidos à gasolina tipo C e a etanol hidratado combustível (Tabela 2). É interessante notar que de 1983 até 2008 a diferença relativa entre os fatores de emissão da gasolina tipo C e do etanol hidratado se tornam cada vez menores, até o ponto em que todos os fatores de emissão do etanol ultrapassam os valores estabelecidos para gasolina tipo C em 2005 e 2008. Isto representa uma tendência oposta aquela observada por Melo *et al.* (2012) e, em parte, por Costa *et al.* (2009), que concluíram que o uso de etanol misturado à gasolina ou na forma de etanol hidratado resultam em reduções nas emissões de CO e HC. Entretanto, isto pode ser consequência de maiores incentivos ao aperfeiçoamento de motores ciclo Otto operando com gasolina tipo C em detrimento do etanol hidratado puro, visto que a gasolina, juntamente com o Diesel, ainda permanece como sendo o combustível automotivo por excelência e de maior difusão mundial.

Tabela 2 - Fatores de emissão de escapamento zero km, em g/km. Fonte: 1º Inventário Nacional de Emissões Atmosféricas por Veículos Automotores Rodoviários, 2011, p. 34.

Ano modelo	Combustível	CO	NO_x	Aldeídos	NMHC¹	CH₄
1995	Gasolina C	4,7	0,6	0,025	0,451	0,149
	Etanol hidratado	4,6	0,7	0,042	0,514	0,186
2000	Gasolina C	0,73	0,21	0,004	0,098	0,032
	Etanol hidratado	0,63	0,21	0,014	0,132	0,048
2005	Gasolina C	0,34	0,09	0,004	0,075	0,025
	Etanol hidratado	0,82	0,08	0,016	0,125	0,045
	Flex - Gasolina C	0,45	0,05	0,003	0,083	0,027
	Flex - Etanol hidratado	0,39	0,1	0,014	0,103	0,037
2008	Gasolina C	0,37	0,039	0,0014	0,042	0,014
	Etanol hidratado	0,67	0,05	0,014	0,088	0,032
	Flex - Gasolina C	0,51	0,041	0,002	0,069	0,023
	Flex - Etanol hidratado	0,71	0,048	0,0152	0,052	0,019

¹Hidrocarbonetos não metano.

2.7 Impactos do uso de etanol super-hidratado em motores ciclo Otto

2.7.1 Operação e desempenho

O uso de etanol super-hidratado tende a provocar uma diminuição na temperatura máxima de combustão (temperatura de chama adiabática) conforme é mostrado na Figura 13. Por outro lado, o decréscimo na temperatura de chama adiabática é acompanhado pelo aumento do calor latente de vaporização da mistura. Estas características do etanol super-hidratado podem ter efeitos adversos na vaporização do combustível e na eficiência da combustão.

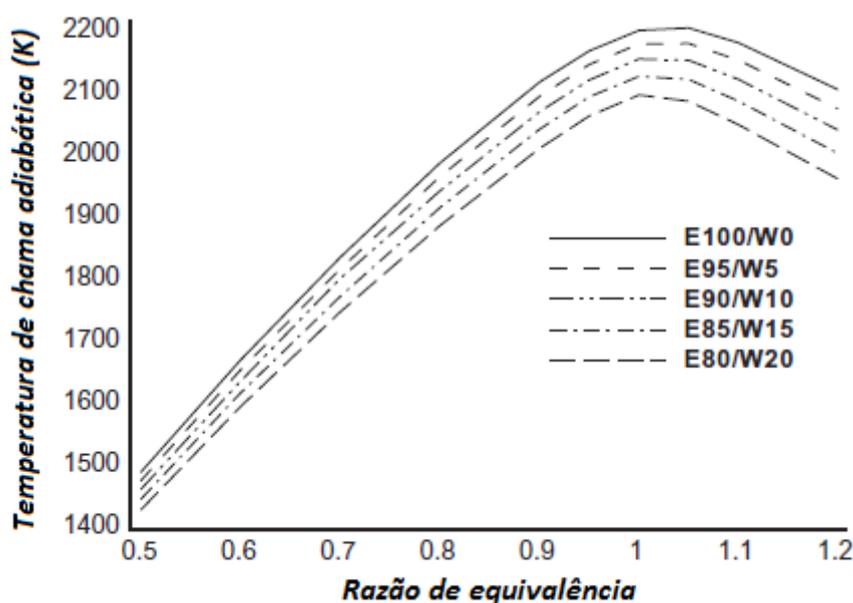


Figura 13 - Temperatura de chama adiabática em função da razão de equivalência para diferentes misturas de etanol super-hidratado. Fonte: Breaux et. al (2012, p. 2).

Gupta et. al (2010) concluíram que a perda de eficiência limita o teor de água que pode ser adicionada ao etanol, propondo que esta perda se torna significativa para teores de água acima de 20%. Utilizando este limite como o máximo de hidratação, ele avaliou a potência disponível no eixo, a eficiência térmica e o consumo específico de combustível em um motor ciclo Otto monocilíndrico modelo

Honda operando com *gasohol* (90% gasolina e 10% etanol em volume), E100 (100% etanol), E90W10 e E80W20 sob diferentes condições de abertura de borboleta. Para 100% de carga, os resultados demonstraram uma sensível diminuição na eficiência térmica – na ordem de 2% - em decorrência da adição de 20% de água, enquanto o consumo específico de combustível aumentou significativamente (cerca de 100 g/kWh). Na Figura 14 são mostrados os resultados encontrados pelos autores.

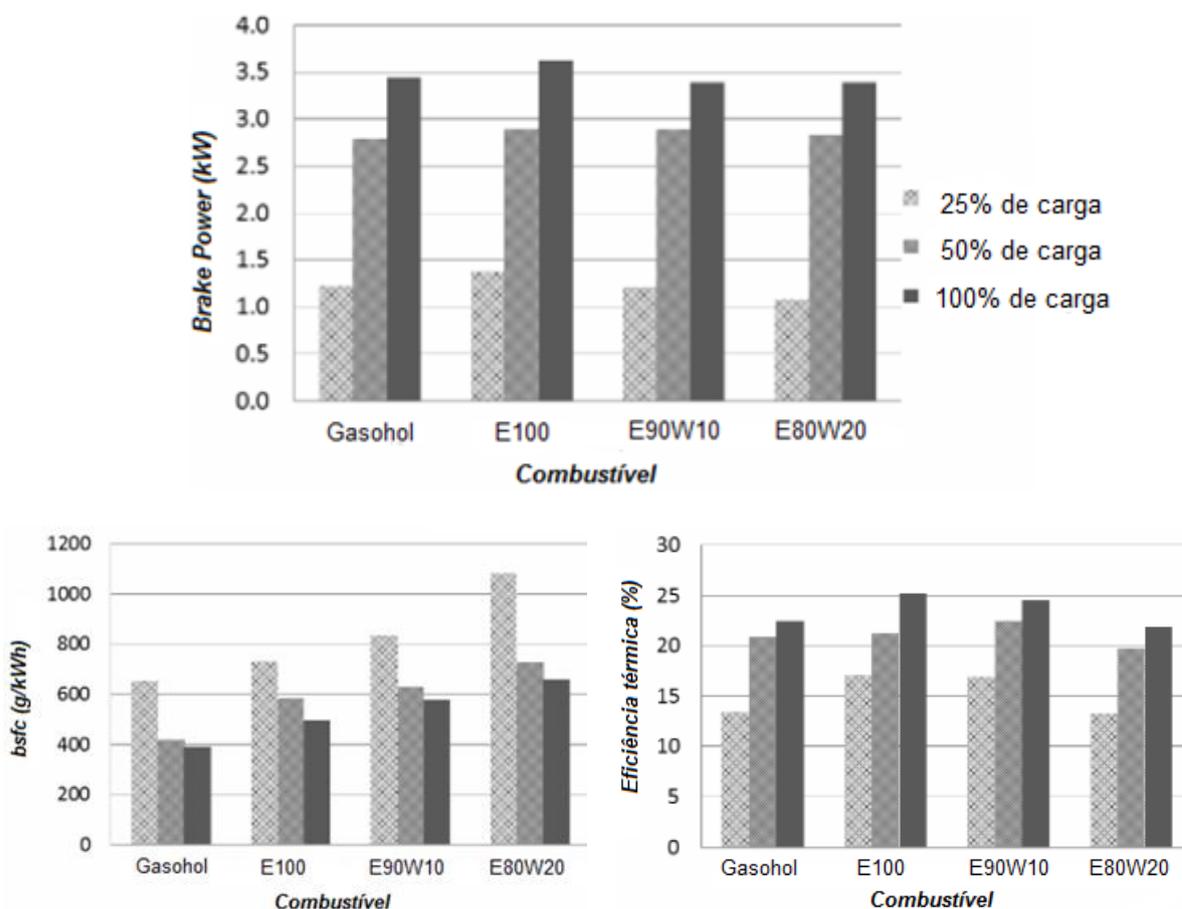


Figura 14 - Parâmetros de desempenho para diferentes misturas de etanol super-hidratado. Fonte: Gupta *et al.* (2010).

Resultados interessantes foram obtidos por Mack *et. al* (2009) que, embora tenha usado um motor de ignição por compressão homogênea da carga (motor HCCI) nos testes com etanol super-hidratado, apresenta conclusões que podem ser extrapoladas para motores ciclo Otto. Em especial, os efeitos sobre a pressão interna do cilindro e a taxa de liberação de calor são significantes (Figura 15). O pico

de pressão apresentou pouca diferença até a mistura E60W40, contudo, quando a concentração de etanol decaiu para 40% em volume, a pressão no cilindro caiu e tornou-se extremamente difícil manter a combustão. O valor máximo da taxa cumulativa de liberação de calor foi de acordo ao diagrama indicador, diminuindo com a adição de água e apresentando uma redução acentuada para mistura com 40% em volume de água.

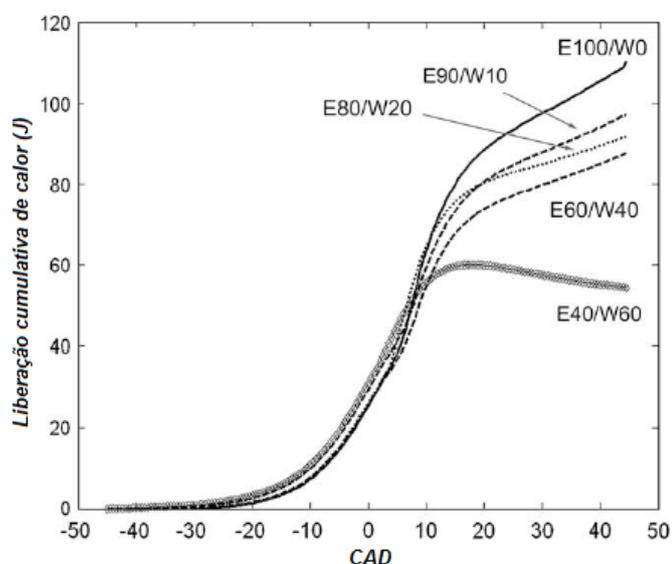


Figura 15 – Taxa de liberação de calor para misturas de etanol super-hidratado. Fonte: Mack *et al.* (2009, p. 785).

Munsin *et al.* (2013) investigou o efeito da hidratação até 40% em volume de água no consumo e eficiência de um pequeno motor ciclo Otto monocilíndrico (389,2 cm³) a 3600 rpm e sob condições de queima estequiométrica, ou seja, com a razão de equivalência igual a unidade ($\phi = 1$). Percebeu-se um aumento de 75% no consumo específico de combustível (do inglês *brake specific consumption*, bsfc) entre as misturas E80W20 e E60W40, atribuído à fração do PCI do combustível destinado ao calor latente de vaporização da água. No mesmo intervalo a eficiência térmica decaiu 5%, devido ao maior tempo de queima (Figura 16).

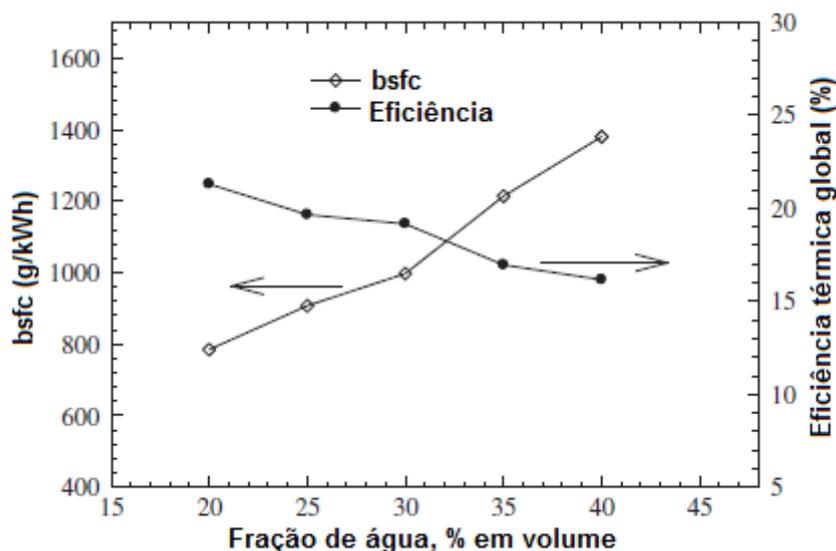


Figura 16 - Consumo específico de combustível (bsfc) e eficiência térmica global para misturas de etanol super-hidratado. Fonte: Munsin *et al.* (2012, p. 5).

Munsin *et al.* (2012) também alertam para a possibilidade de contaminação do óleo lubrificante com o aumento do teor de água, com a formação de microemulsões de reduzida capacidade de lubrificação e para a oxidação de peças do motor, observada vários dias após os testes. Estas são questões importantes no que diz respeito ao uso comercial de etanol super-hidratado em motores.

2.7.2 Emissões

Através de experimentos conduzidos em um combustor, Breaux *et al.* (2012) forneceram uma visão detalhada de como o aumento da fração de água incide sobre a temperatura dos gases de escape e a concentração de CO₂ na exaustão. Ao testar amostras compreendidas entre o etanol anidro e o E65W35 foi possível concluir que a temperatura média de escape dos gases é levemente afetada pelo teor de água, tendendo a diminuir conforme este aumenta (Figura 17). A concentração de CO₂, por outro lado, tende a se manter aproximadamente constante, independente da proporção de água usada, sendo, por outro lado, fortemente dependente da razão de equivalência (Figura 18).

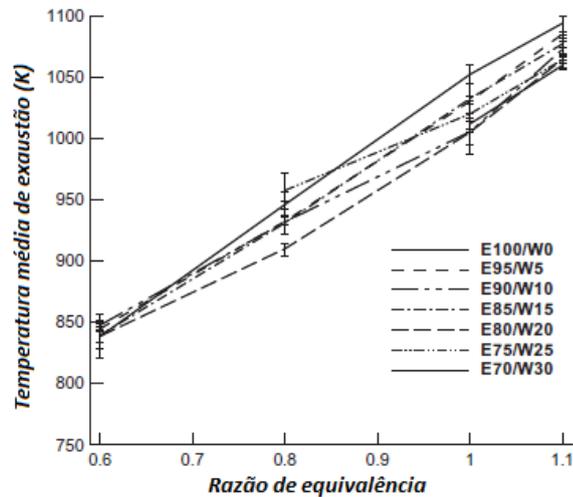


Figura 17 - Temperatura média dos gases de exaustão para diferentes misturas etanol-água. Fonte: Breaux *et al.* (2012, p. 10).

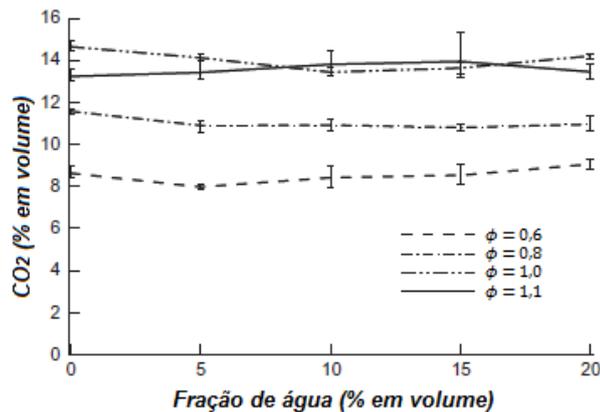


Figura 18 - Fração volumétrica de CO₂ nos gases de exaustão para diferentes misturas etanol-água. Fonte: Breaux *et al.* (2012, p. 11).

Os já citados Mack *et al.* (2009) e Gupta *et al.* (2010) também realizaram investigações sobre a influência do teor de água nas emissões de motores operando com etanol super-hidratado. Mack *et al.* (2009) concluíram que maiores graus de hidratação do combustível implica em um aumento no nível de HC nos gases de escape, indicando que isto é decorrência da combustão incompleta do etanol. Em paralelo, os dados mostraram um decréscimo na concentração de O₂ na exaustão, fenômeno atribuído ao deslocamento do oxigênio pelo vapor de água durante a fase de admissão. Isto indica que o aumento do teor de água implica em menos oxigênio aspirado durante a admissão (MACK *et al.*, 2009, p. 787). A combustão incompleta

também conduziu a níveis maiores de CO nos gases de escape. A Figura 19 resume estes resultados.

No trabalho de Gupta *et al.* (2010) o teor de CO aumentou pouco com a contínua hidratação (2,06% no E80W20 em relação ao E100, para 25% de abertura do acelerador), ao contrário do HC, que aumentou de forma proporcional a hidratação, efeito este novamente atribuído à combustão incompleta. Por outro lado, as emissões de NO_x caíram 79,18% na mistura E80W20 em comparação com o *gasohol*. É interessante notar o efeito da carga especialmente sobre as emissões de CO, que tiveram comportamento diverso de acordo com a abertura da válvula de controle de aceleração (Figura 20).

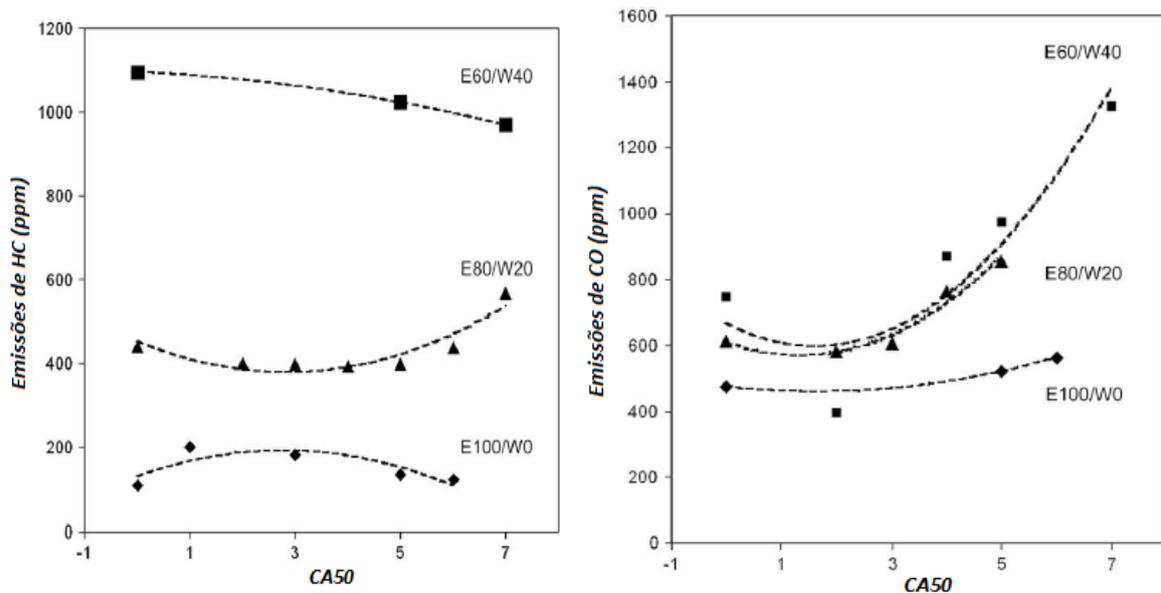


Figura 19 - Dados de emissões para o HC e o CO em motor HCCI de quatro cilindros em função do CA50. Fonte: Mack *et al.* (2009, p.786).

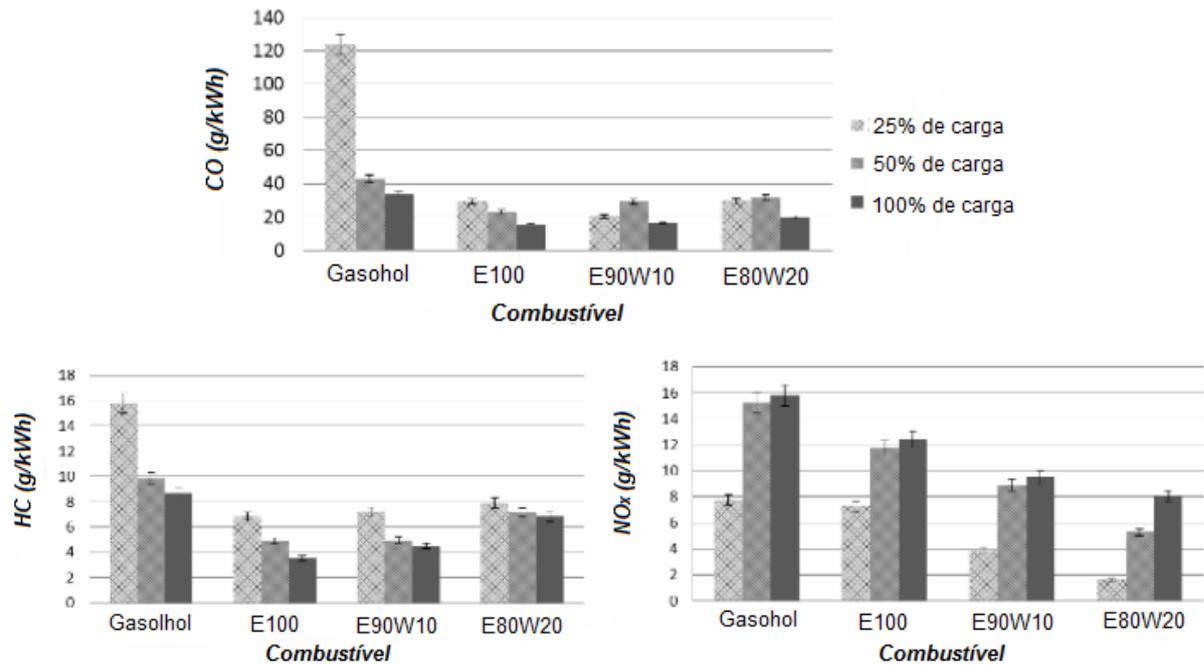


Figura 20 - Dados de emissões para o CO, HC e NO_x em motor ciclo Otto modelo Honda em função da fração de água no combustível. Fonte: Gupta et. al (2010).

De forma geral, informações sobre outros estudos relacionados ao uso de etanol super-hidratado em motores geralmente se baseiam no uso direto de misturas em motores HCCI ou então em motores Diesel convertidos em HCCI e munido de um dispositivo de ignição catalítica, como é o caso dos trabalhos desenvolvidos no *National Institute for Advanced Transportation Technology* (NIATI) (Beyerlein et. al, 2001; CORDON et. al, 2009).

2.8 Modelagem e simulação de motores ciclo Otto

A modelagem matemática e a simulação de ciclos motores têm contribuído notavelmente no desenvolvimento dos motores de combustão interna desde seus primórdios. Em 1876, Nicolaus A. Otto usou simulações baseadas na teoria termodinâmica clássica para calcular o trabalho esperado de ciclos motores antes do uso de protótipos (Figura 21). Estas simulações previram a vantagem decorrente da compressão da mistura ar-combustível comparada à combustão realizada em pressão atmosférica, fornecendo subsídios que proporcionaram o desenvolvimento

dos motores de combustão interna modernos. Desde então, o desejo de simular diferentes tipos de motores antes de construí-los têm acompanhado projetistas e pesquisadores ao longo do tempo.

Para representar os processos que governam a operação e as emissões em motores, Heywood (1988, p. 749) cita dois tipos de modelos desenvolvidos: os *termodinâmicos*, com as equações estruturadas sobre o princípio da conservação da energia; e os *fluidodinâmicos*, onde predominam análises do movimento do fluido. Outras denominações dadas aos modelos termodinâmicos são: *zerodimensional* (não possuem qualquer modelagem do fluxo e de fenômenos de transferência), *fenomenológico* (onde são adicionados os efeitos de transferência de calor e massa em cada evento dentro das equações de conservação da energia) e *quasidimensionais* (especificam algumas características geométricas dentro da sequência de eventos, como a geometria da chama). Os modelos fluidodinâmicos são comumente chamados de *multidimensionais*, pois fornecem informação geométrica detalhada sobre o movimento do fluido baseadas em equações de campos de fluxo.

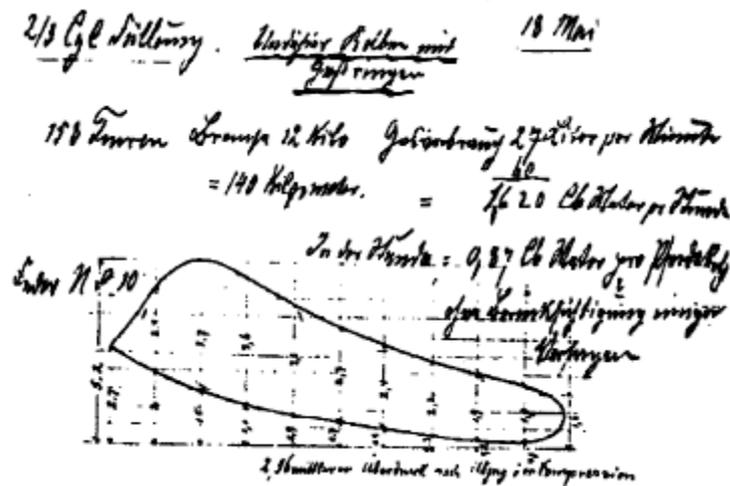


Figura 21 – Primeiro diagrama pressão-volume experimental obtido por Otto em 18/05/1876. Fonte: Chiodi (2011, p.10).

A complexidade dos processos que ocorrem em um motor torna difícil a construção de um modelo que possa simular sua operação unicamente com as equações de conservação, de forma que relações empíricas e aproximações são

frequentemente usadas para o entendimento de certos fenômenos (HEYWOOD, 1988, p.749-750). Dentre os modelos empíricos, destacam-se o modelo de *Wiebe* para estimativa da fração queimada em motores de ignição por centelha e a correlação de *Woschni* para determinar o coeficiente de transferência convectiva de calor no interior do cilindro. As equações empíricas que regem estes modelos são largamente difundidas nas principais obras que tratam sobre motores. LOUNICI *et al.* (2010) apresentam, além da correlação de *Woschni*, os modelos de *Sitkei's* e *Hohenberg* para estimativa do coeficiente de troca térmica, considerando este último o melhor pela sua eficácia, rápida resposta, fácil utilização e por eliminar superestimativas do coeficiente de troca térmica durante a fase de combustão, característica atribuída ao modelo de *Woschni*. (Lounici et. al, 2010, p. 22).

A obra de Ferguson (1986) se destaca por agrupar os principais fatores que influenciam na transferência de calor e massa no cilindro, incluindo modelos de perda de calor para o fluido de resfriamento, perdas de massa nos anéis (*blow-by*) e por efeitos de fricção. Também são mostrados programas em *Fortran* simulando combustão, perdas de calor, enchimento e esvaziamento do cilindro e injeção de combustível. Quanto às propriedades termodinâmicas dos gases de combustão, o método de cálculo utiliza procedimentos desenvolvidos por Gordon e McBride (1971) e dados das tabelas termodinâmicas editadas pela *National Bureau of Standards*, chamadas de *tabelas JANAF* (1971). No trabalho de Buttsworth (2002) os programas originais em *Fortran* foram compilados e implementados em *Matlab*, de forma que um modelo fenomenológico completo é apresentado para análise de motores ciclo Otto. Estas rotinas são a base principal do modelo e das simulações desenvolvidas neste estudo.

O trabalho de Heywood (1988) realiza uma extensa compilação de modelos utilizados em motores de combustão interna, podendo ser citado entre as melhores literaturas para explicar os fenômenos que ocorrem durante a operação de motores ciclo Otto e ciclo Diesel. Em seu 14º capítulo, específico sobre modelagem, apresenta uma gama de modelos termodinâmicos e inclui detalhes sobre modelos multidimensionais de combustão, atomização de combustível, turbulência e propagação de chama.

O foco de Mcallister (2011) incide sobre a fase de combustão no decorrer do ciclo, dedicando um capítulo exclusivo a modelos de propagação de chamas pré-

misturadas. Também inclui modelos cinéticos para reações elementares, de atraso de ignição e de propriedades de transporte na combustão em motores ciclo Otto e Diesel.

Chiodi (2011, p. 29) denomina *Real Working-Process Analysis* ao balanço de energia em estado transiente da câmara de combustão durante cada fase do ciclo que permite uma análise profunda dos principais processos termodinâmicos que ocorrem no interior do cilindro. Também ressalta que esta abordagem – *fenomenológica* - é até o momento aquela na qual a maior parte do esforço científico tem sido investido, pois permite acoplar o modelo diretamente com testes de bancada nos quais se obtém o perfil de pressão do cilindro em função do tempo ou do ângulo de virabrequim.

No presente momento, variados modelos fenomenológicos e quasidimensionais têm sido usados em pesquisas para simulação e otimização de motores, apresentando resultados satisfatórios tal como atestam Curto-Risso *et al.* (2010), Abu-Nada *et al.* (2007), D'Errico *et al.* (2010) e Sekmen *et al.* (2007). Em especial, Rakopoulos *et al.* (2005) se destacam pelo uso de um modelo fenomenológico para realizar uma análise exérgica detalhada dos subsistemas de um motor (compressor, intercooler, coletor de admissão, cilindro, coletor de exaustão e turbina) em motores ciclo Otto e Diesel.

Os modelos de duas zonas são uma interessante ferramenta para simulação de motores. Nesta abordagem, duas zonas, cada qual espacialmente homogênea, são definidas durante o processo de combustão. Estas zonas estão separadas por uma interface de espessura infinitesimal, e denominam-se “não queimada”, na qual a mistura ar-combustível ainda não reagiu, e “queimada”, que consiste nos produtos da combustão. O sucesso de simulações com esta abordagem depende da precisão do modelo de transferência de calor, conforme afirma o já citado estudo de Lounici *et al.* (2010). Em seu trabalho, eles investigam as correlações empíricas usadas para estimativa do coeficiente de troca térmica, a fim de otimizar o uso de modelos de duas zonas na simulação de motores ciclo Otto.

Os aumentos na capacidade computacional a partir da década de 1980 tornou viável a solução numérica das equações de conservação que governam o escoamento e a transferência de calor dentro de motores em modelos multidimensionais. O estudo de processos em regime transiente unidimensional e

tridimensional deu origem à Fluidodinâmica Computacional (CFD, do inglês *Computer Fluid Dynamics*), que hoje representa a mais sofisticada abordagem numérica na investigação de motores de combustão interna (Chiodi, 2011, p.52).

Em conjunto com a pesquisa, o CFD tem-se revelado um grande apoio ao projeto de motores e desenvolvimento de métodos na indústria automotiva. Entretanto, o elevado tempo computacional (*CPU-time*) associado às simulações em CFD nem sempre está de acordo com os tempos de desenvolvimento que um projeto necessita para ser competitivo no mercado (Figura 22). Adicionalmente, o custo das licenças de softwares especializados é elevado, e sua complexidade requer recursos de computação intensivos: *clusters* com processamento paralelo, ainda assim exigindo um tempo de simulação elevado (Chiodi, 2011, p.20).

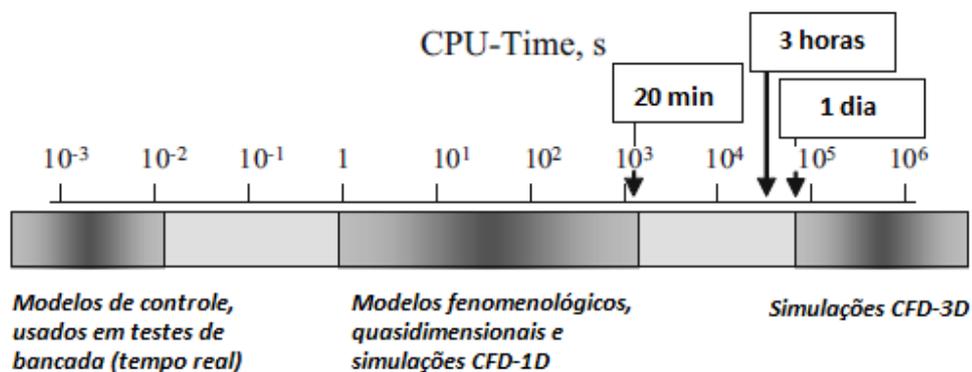


Figura 22 - Tempo computacional associado a ferramentas usadas para simulação do ciclo de operação de motores. Fonte: Chiodi, 2011, p.20.

O recente trabalho de Pariotis *et al.* (2012) faz uma interessante comparação entre o tempo computacional e os resultados obtidos entre três modelos de complexidade crescente: um modelo fenomenológico de zona única (*single zone model*), um modelo quasidimensional, e um modelo CFD. O primeiro calculou de forma satisfatória a pressão interna no cilindro, subestimando, porém, a temperatura média dos gases no PMS (Figura 23). Sua principal vantagem foi o baixo tempo computacional, de 1 segundo, comparado aos tempos de 6 minutos e 20 horas requerido pelos modelos quasidimensional e CFD, respectivamente.

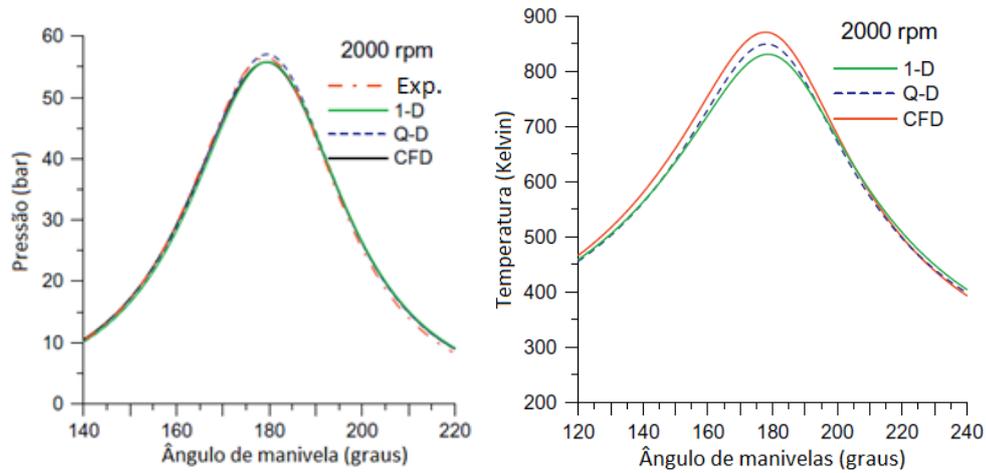


Figura 23 - Comparação entre estimativas da pressão e temperatura do cilindro por três diferentes modelos (1-D - fenomenológico; Q-D – quasidimensional e CFD – fluidodinâmico computacional). Fonte: Pariotis *et al.* (2012).

A partir destes resultados pode-se afirmar que o uso de modelos fenomenológicos é plenamente justificado quando a precisão requerida é suficiente para uma boa representação do ciclo, dispensando o uso de modelos CFD, que embora precisos, possuem a complexidade e o elevado custo computacional como características.

3 DESCRIÇÃO DO MODELO

O conjunto de rotinas usado nas simulações consiste em um modelo de duas zonas (*two-zone model*) no qual, entre as principais equações que o governam, figuram a equação de conservação de energia para um sistema aberto, a equação de conservação de massa, dos gases ideais e diferentes submodelos que permitem a simulação do ciclo termodinâmico. Estes submodelos englobam a combustão, transferência de calor, variação de volume do cilindro e composição da mistura entre ar, combustível e gases residuais. A maior parte do modelo foi desenvolvida usando como base a descrição matemática fornecida por Ferguson (1986). Entretanto, submodelos como o de combustão, composição da mistura e transferência de calor foram modificados de acordo com a resposta desejada nas simulações, de forma que a contribuição de trabalhos tais quais o de Heywood (1988), Turns (2000), Buttsworth (2002) e Lounici *et al.* (2010) foram de especial importância.

Os seguintes pressupostos e aproximações são utilizados no presente modelo:

- 1) Admite-se que o conteúdo do cilindro se encontra perfeitamente misturado e espacialmente homogêneo no que se refere a composição e propriedades termodinâmicas durante as fases do ciclo;
- 2) No processo de combustão, duas zonas (cada qual espacialmente homogênea) são consideradas, uma zona queimada (*burned zone*) e uma zona não queimada (*unburned zone*). Considera-se que as duas zonas estão separadas por uma interface de espessura infinitesimal;
- 3) Antes do início da combustão o modelo pode ser considerado como sendo de zona única (*single zone model*);
- 4) Todos os gases são considerados ideais no decorrer dos ciclos do motor. Da mesma forma, as propriedades termodinâmicas são determinadas admitindo-se comportamento ideal da mistura entre etanol hidratado, ar e gases residuais;

- 5) A pressão é considerada homogênea em todo o cilindro, sendo a mesma para a zona queimada e a zona não queimada;
- 6) A transferência de calor entre as duas zonas é considerada desprezível;
- 7) As variações de temperatura das paredes do cilindro são consideradas desprezíveis em comparação a variação de temperatura dos gases de combustão, sendo considerada constante;
- 8) Admite-se que a mistura ar-combustível se encontra totalmente vaporizada no momento da admissão, inclusive sob altos níveis de hidratação do etanol.
- 9) O modelo simula o intervalo do ciclo no qual as válvulas de admissão e exaustão estão fechadas, de forma que se admite que a condição inicial é aquela na qual o ciclo de compressão inicia (PMI, CAD = -180°) e o estado final aquele no qual o ciclo de expansão termina (PMI, CAD = $+180^\circ$);

A condição (8) implica que a perda de calor referente a possíveis efeitos de vaporização da água no interior do cilindro não será computada como um termo explícito no modelo de transferência de calor. Optou-se por esta assertiva porque, do contrário, a mistura ar-combustível não se encontraria totalmente vaporizada durante a admissão, de forma que fenômenos adicionais de vaporização e transferência de massa entre fases deveriam ser levados em consideração, tornando o modelo demasiadamente oneroso. Sendo assim, admite-se que, no que concerne a transferência de calor, o efeito decorrente do crescente teor de água no combustível incide unicamente sobre o coeficiente de troca térmica das duas zonas, mais especificamente, sobre os valores dos coeficientes da equação de *Hohenberg* que serão estimados. A Figura 24 mostra uma representação do sistema.

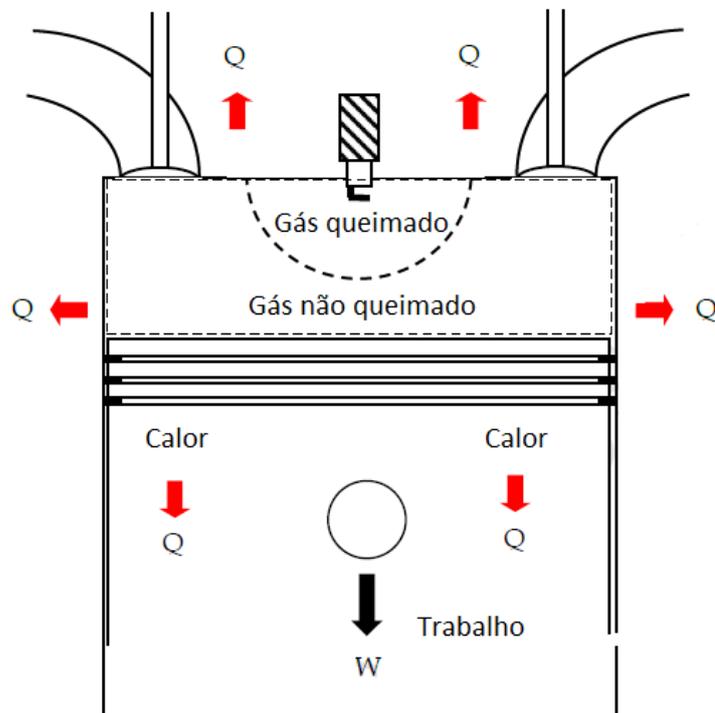


Figura 24 - Representação do sistema analisado mediante o modelo de duas zonas. Fonte: LOUNICI *et al.*, 2010, p. 5.

A primeira lei da termodinâmica para um sistema aberto pode ser representada como:

$$\dot{E} = \dot{Q} - \dot{W} + \sum_{j=1}^2 \dot{m}_j \dot{h}_j \quad (1)$$

A energia do sistema, E , é igual à diferença entre o calor gerado ou perdido em cada parte da superfície de controle, Q , e o trabalho realizado pelo sistema, W . O produto $m.h$ contabiliza o valor líquido entre a entrada e a saída energia decorrente da alteração de estado do fluido de trabalho.

Outra maneira de expressar a energia de um sistema termodinâmico é através da seguinte relação:

$$\dot{E} = \Delta U = \delta(mu) \quad (2)$$

O objetivo do modelo é definir a mudança de estado termodinâmico no decorrer do ciclo em função do ângulo de virabrequim, θ . Assim, substituindo a equação (2) em (1) e tomando a derivada desta última, obtém-se:

$$m \frac{du}{d\theta} + u \frac{dm}{d\theta} = \frac{dQ}{d\theta} - P \frac{dV}{d\theta} + \frac{d(\dot{m}_i \dot{h}_i)}{d\theta} \quad (3)$$

Como o modelo considera um motor no qual as válvulas estão fechadas, a variação de massa no cilindro decorre somente de perdas decorrentes de vazamentos nos anéis (*blow-by*), portanto:

$$\frac{d(\dot{m}_i \dot{h}_i)}{d\theta} = - \frac{\dot{m}_b \dot{h}_b}{\omega} \quad (4)$$

Substituindo a equação (4) em (3) obtemos a forma geral da equação de energia para um volume de controle que acomode o conteúdo do cilindro:

$$m \frac{du}{d\theta} + u \frac{dm}{d\theta} = \frac{dQ}{d\theta} - P \frac{dV}{d\theta} - \frac{\dot{m}_b \dot{h}_b}{\omega} \quad (5)$$

3.1 Propriedades termodinâmicas

3.1.1 Propriedades do ar e dos produtos de combustão

A estimativa das propriedades termodinâmicas destes componentes é realizada através das equações desenvolvidas por Gordon e McBride (1971), que ajustaram curvas polinomiais a partir dos dados fornecidos nas tabelas termoquímicas da JANAF (1971). A variação com a temperatura da entalpia e entropia específicas, bem como do calor específico, são dadas da seguinte forma:

$$\frac{Cp_i}{R} = a_{1,i} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 \quad (6.1)$$

$$\frac{h_i}{RT} = a_{1,i} + \frac{a_{2,i}}{2}T + \frac{a_{3,i}}{3}T^2 + \frac{a_{4,i}}{4}T^3 + \frac{a_{5,i}}{5}T^4 + \frac{a_{6,i}}{T} \quad (6.2)$$

$$\frac{s_i^0}{R} = a_{1,i} \ln T + a_{2,i}T + \frac{a_{3,i}}{2}T^2 + \frac{a_{4,i}}{3}T^3 + \frac{a_{5,i}}{4}T^4 + a_{7,i} \quad (6.3)$$

Tal como no trabalho de Buttsworth (2001), os coeficientes a_1 até a_7 são constantes para duas faixas de temperatura: $300 < T < 1000K$, e $1000 < T < 5000K$. A primeira faixa é conveniente para cálculos na zona não queimada, enquanto a segunda faixa é útil para determinação de propriedades da zona queimada. O subíndice i é referente à espécie da qual se deseja obter a propriedade. São consideradas dez espécies presentes no processo de combustão: CO_2 , H_2O , N_2 , O_2 , CO , H_2 , H , O , OH e NO . Os valores dos coeficientes para cada espécie, em cada faixa de temperatura, estão tabelados no Apêndice A.

3.1.2 Propriedades do combustível

As propriedades do combustível não são satisfatoriamente determinadas quando as equações (6.1) a (6.3) são utilizadas. HEYWOOD (1988) apresenta ajustes que diferem um pouco das relações mostradas para o ar e produtos de combustão. É válido ressaltar que os coeficientes definidos nas equações (7.1) a (7.3) para as curvas do combustível são constantes em qualquer faixa de temperatura. Estes coeficientes estão tabelados no Apêndice B. As curvas definidas pelo autor são da seguinte forma:

$$\frac{Cp_i}{R} = a_{1,f} + a_{2,f}T + a_{3,f}T^2 + a_{4,f}T^3 + \frac{a_{5,f}}{T^2} \quad (7.1)$$

$$\frac{h_i}{RT} = a_{1,f} + \frac{a_{2,f}}{2}T + \frac{a_{3,f}}{3}T^2 + \frac{a_{4,f}}{4}T^3 - \frac{a_{5,f}}{T^2} + \frac{a_{6,f}}{T} \quad (7.2)$$

$$\frac{s_i^0}{R} = a_{1,f} \ln T + a_{2,f}T + \frac{a_{3,f}}{2}T^2 + \frac{a_{4,f}}{3}T^3 - \frac{a_{5,f}}{2}T^2 + a_{7,f} \quad (7.3)$$

3.1.3 Outras relações termodinâmicas

A equação (5) mostra que as propriedades termodinâmicas variam em função do ângulo de virabrequim, mas, ao mesmo tempo, estas propriedades também são funções da temperatura e da pressão. Desta forma, temos as seguintes relações funcionais:

Energia interna específica: $u = f(T, P) \rightarrow u = \frac{U}{m} = xu_b + (1-x)u_u \quad (8.1)$

Volume específico: $v = f(T, P) \rightarrow v = \frac{V}{m} = xv_b + (1-x)v_u \quad (8.2)$

Entalpia específica:
$$h = f(T, P) \quad (8.3)$$

Entropia específica:
$$s_u = f(T_u, P) \quad (8.4)$$

Nestas equações, o parâmetro x representa a fração entre gases queimados e não queimados. A entropia é avaliada somente na zona de gases não queimados, pois esta zona é considerada como um sistema aberto perdendo massa devido ao processo de combustão e de vazamento.

As propriedades termodinâmicas da zona queimada e não queimada podem ser expressas como função do ângulo de virabrequim, da temperatura e da pressão. Assim temos que, para o volume específico, a relação funcional entre v_b , T_b e P na zona queimada pode ser representada como:

$$v_b = f(T_b, P) \quad (9.1)$$

Diferenciando esta expressão em relação ao ângulo de virabrequim:

$$\frac{dv_b}{d\theta} = \frac{\partial v_b}{\partial T_b} \frac{dT_b}{d\theta} + \frac{\partial v_b}{\partial P} \frac{dP}{d\theta} \quad (9.2)$$

Em seu modelo original, FERGUSON (1986) utiliza essa equação em sua forma logarítmica, resultando em:

$$\frac{dv_b}{d\theta} = \frac{v_b}{T_b} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{dT_b}{d\theta} + \frac{v_b}{P} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} \frac{dP}{d\theta} \quad (9.3)$$

Por analogia, a expressão para v_u , o volume específico na zona não queimada, fica:

$$\frac{dv_u}{d\theta} = \frac{v_u}{T_u} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \frac{dT_u}{d\theta} + \frac{v_u}{P} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln P} \frac{dP}{d\theta} \quad (9.4)$$

Para a energia interna específica, a relação funcional entre u_b , T_b e p para a zona queimada pode ser representada das seguintes formas:

$$u_b = f(T_b, P) \quad (10.1)$$

$$\frac{du_b}{d\theta} = \frac{\partial u_b}{\partial T_b} \frac{dT_b}{d\theta} + \frac{\partial u_b}{\partial P} \frac{dP}{d\theta} \quad (10.2)$$

Traduzindo estas expressões na forma de derivadas logarítmicas, temos as seguintes equações para a zona queimada e não queimada, respectivamente:

$$\frac{du_b}{d\theta} = \left(c_{pb} - \frac{Pv_b}{T_b} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right) \frac{dT_b}{d\theta} - v_b \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} + \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} \right) \frac{dP}{d\theta} \quad (10.3)$$

$$\frac{du_u}{d\theta} = \left(c_{pu} - \frac{Pv_u}{T_u} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right) \frac{dT_u}{d\theta} - v_u \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} + \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln P} \right) \frac{dP}{d\theta} \quad (10.4)$$

Por fim, a relação funcional e a equação de estado relacionando a entropia dos gases não queimados à temperatura e a pressão são:

$$s_u = f(T_u, P) \quad (11.1)$$

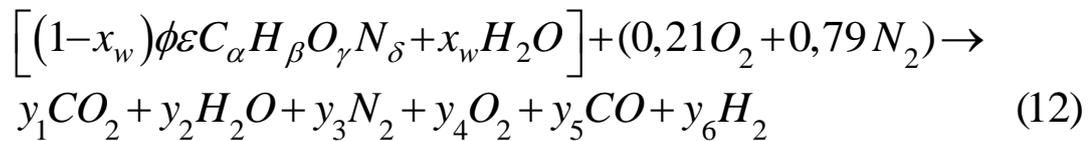
$$\frac{ds_u}{d\theta} = \frac{\partial s_u}{\partial T_u} \frac{dT_u}{d\theta} + \frac{\partial s_u}{\partial P} \frac{dP}{d\theta} \quad (11.2)$$

Sabendo que $(\partial s_u / \partial T_u) = (C_{pu} / T_u)$ e $(\partial s_u / \partial P) = (-\partial v_u / \partial T_u)$, os termos da equação (11.2) resultam em:

$$\frac{ds_u}{d\theta} = \frac{c_{pu}}{T_u} \frac{dT_u}{d\theta} - \frac{v_u}{T_u} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \frac{dP}{d\theta} \quad (11.3)$$

3.2 Composição inicial da mistura

Para determinação da composição inicial da mistura entre ar, combustível e gases residuais utiliza-se a sub-rotina desenvolvida por FERGUSON (1986, p.111) denominada *Fuel-Air Residual Gases* (FARG). Este submodelo, em conjunto com as equações polinomiais de propriedades termodinâmicas, permite determinar o estado termodinâmico da mistura inicial na faixa de temperatura de $300 < T < 1000K$. Para tanto, é necessário escrever uma reação global que represente a queima de um combustível hidratado. Isto pode ser feito pela inserção direta da fração molar de água no combustível, x_w , na equação geral de combustão da seguinte forma:



Onde ϕ representa a razão de equivalência da mistura, definida como:

$$\phi = \frac{F_s \text{ (atual)}}{F_s \text{ (estequiométrica)}} \quad (13)$$

Onde F_s representa a razão entre combustível e ar. No caso em que $\phi < 1$ a mistura é dita pobre (em termos de combustível), enquanto para $\phi > 1$ a mistura é dita rica e para $\phi = 1$ a mistura é estequiométrica. Aproximações convenientes para os casos de mistura pobre e rica são os seguintes:

$$\begin{aligned} \phi < 1 & \quad y_5 = y_6 = 0 \\ \phi > 1 & \quad y_4 = 0 \end{aligned}$$

Para misturas pobres ou estequiométricas as equações de balanço atômico são suficientes para determinar a composição do produto. No caso de mistura rica existe a possibilidade de dissociação do CO_2 novamente em CO e H_2O . Devido a isso, FERGUSON (1986) introduz uma constante de equilíbrio da seguinte forma:



$$K = \frac{y_2 y_5}{y_1 y_6} \quad (15)$$

Soluções para os valores de y_i considerando diferentes faixas de ϕ são dadas na Tabela 3.

Tabela 3 - Produtos de combustão à baixa temperatura, v_i (mols/mols de ar). Fonte: FERGUSON, 1986, p. 109.

i	Espécie	$\phi \leq 1$	$\phi > 1$
1	CO_2	$\alpha\phi\varepsilon(1-x_w)$	$\alpha\phi\varepsilon(1-x_w) - y_5$
2	H_2O	$\beta\alpha\varepsilon/2(1-x_w) + x_w$	$0,42 - \phi\varepsilon(2\alpha - \gamma)(1-x_w) + y_5 + x_w$
3	N_2	$0,79 + \delta\phi\varepsilon/2$	$0,79 + \delta\phi\varepsilon/2$
4	O_2	$0,21(1-\phi)$	0
5	CO	0	y_5
6	H_2	0	$0,42(\phi-1) - v_5$

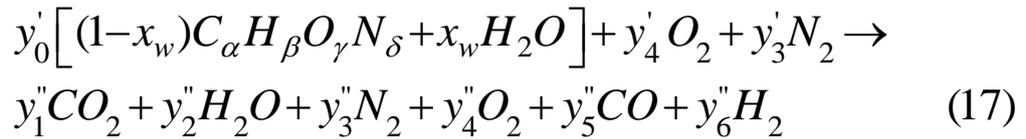
No caso de mistura rica, o parâmetro y_5 é dado pela solução da equação quadrática:

$$y_5 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (16)$$

Onde:

$$\begin{aligned}
 a &= 1 - K \\
 b &= 0,42 - \phi\varepsilon(2 - \gamma)(1 - x_w) + K \left[0,42(\phi - 1) + \alpha\phi\varepsilon(1 - x_w) \right] \\
 c &= -0,42\alpha\phi\varepsilon(\phi - 1)(1 - x_w)K
 \end{aligned}$$

Como existe uma fração de gás residual misturado ao combustível e ao ar é necessário determinar a composição desta mistura. FERGUSON (1986, p. 111) define a *fração mássica residual*, f , como um parâmetro conveniente para isto. Reescrevendo a equação de combustão, temos:



Onde v'_i e v''_i são os coeficientes dos reagentes e produtos, respectivamente. Desta forma a fração mássica de cada componente considerando a mistura de gás residual com ar e combustível pré-misturado é dada por:

$$x_i = (1 - f)x'_i + fx''_i \quad (18)$$

E a fração molar é dada por:

$$y_i = (1 - y_r)y'_i + y_r y''_i \quad (19)$$

Onde a fração molar residual, y_r , é dada por:

$$y_r = \left[1 + \frac{M''}{M'} \left(\frac{1}{f} - 1 \right) \right]^{-1} \quad (20)$$

Uma vez conhecida a composição da mistura, as propriedades termodinâmicas de cada componente podem ser determinadas a partir das equações polinomiais dadas por Gordon e McBride (1971), equações (6.1), (6.2) e (6.3). Em seguida, as propriedades específicas da mistura podem ser encontradas mediante as seguintes relações:

$$h = \sum_i y_i h_i \quad (21)$$

$$Cp = \sum_i y_i Cp_i \quad (22)$$

$$s = \sum_i y_i s_i \quad (23)$$

Os valores nominais destas propriedades são encontrados da seguinte forma:

$$M_{mist} = M_{fuel} \cdot y_{fuel} + \sum_{i=1}^6 M_i y_i \quad (24)$$

$$R = \frac{R_u}{MW} = \frac{8314,34 \text{ J/mol.K}}{MW} \quad (25)$$

$$H = RT h \quad (26)$$

$$U = H - RT \quad (27)$$

$$v = RT/P \quad (28)$$

$$S = R(-\log(P/101,325 \times 10^3) + s) \quad (29)$$

$$Cp = R Cp \quad (30)$$

3.3 Volume e massa no cilindro

O volume do cilindro em um dado ângulo de virabrequim é obtido a partir da razão de compressão r , o volume no PMS (V_{TDC}) e $eps = S/2l$ (onde S é o curso do pistão e l o comprimento da biela), sendo dado por:

$$V = V_{TDC} \left\{ 1 + \frac{r-1}{2} \left[1 - \cos \theta + \frac{1}{eps} \left(1 - \left(1 - eps^2 \sin^2 \theta \right)^{1/2} \right) \right] \right\} \quad (31)$$

A variação de massa no interior do cilindro é função somente das perdas por vazamento, sendo dada por:

$$m = m_1 \exp \left[-C \frac{(\theta - \theta_1)}{\omega} \right] \quad (32)$$

A massa inicial m_1 em $\theta = \theta_1$ (início da compressão) é especificada através do volume específico da mistura na pressão e temperatura inicial:

$$m_1 = \frac{V bdc}{v_1} \quad (33)$$

3.4 Combustão

A fração mássica queimada, doravante denominada MFB (do inglês *mass fraction burned*) durante a combustão é estimada mediante a correlação empírica de *Wiebe*, conforme exposto em Heywood (1988, p.390):

$$x_b = 1 - \exp \left[-a \left(\frac{\theta - \theta_i}{\Delta\theta} \right)^{n+1} \right] \quad (34)$$

Onde θ_i é o ângulo no qual a combustão tem início, $\Delta\theta$ é a duração da combustão e a e n são parâmetros de ajustes, que influenciam significativamente no formato da curva da fração queimada. Heywood (1988) recomenda valores típicos como sendo $a = 5$ e $n = 2$. No presente modelo, estes coeficientes serão estimados mediante o método dos mínimos quadrados não lineares. O uso deste método está descrito no item 3.7, “Métodos Numéricos e Computacionais”.

3.5 Temperatura de chama adiabática

No presente modelo, a temperatura de chama adiabática (TCA) é usada como a temperatura inicial do gás queimado no início da combustão. Usa-se o mesmo submodelo desenvolvido por Buttsworth (2002) no qual é dada uma estimativa inicial para a TCA (2000K) e uma comparação entre a entalpia dos produtos de combustão e da mistura não queimada é realizada. A temperatura é então ajustada até que as entalpias das duas zonas assumam valores iguais. Pela definição de temperatura de chama adiabática (TURNS, 2000, p.32) temos que é aquela na qual:

$$h_{reag}(T_i, P) = h_{prod}(T_{ad}, P) \quad (35)$$

No caso específico, temos:

$$h_{reag} = h_u(T_u, P) \quad (\text{início da compressão}) \quad (36)$$

$$h_{prod} = h_b(T_b, P), \quad T_b = T_{ad} \quad (37)$$

E a TCA é encontrada da seguinte forma:

$$T_b = T_{b(n)} + \Delta T_b \quad (38)$$

Em que n corresponde ao número da iteração (máximo de 50). O valor de ΔT_b é:

$$\Delta T_b = \frac{h_u - h_b}{C_p} \quad (39)$$

Desde que:

$$\frac{\Delta T}{T_{b(n)}} > tol, \quad tol = 1 \times 10^{-5} \quad (40)$$

3.6 Transferência de calor

O calor transferido no sistema, representado pelo lado direito da equação (5), pode ser expresso em termos do calor transmitido pela zona queimada e não queimada:

$$\frac{dQ}{d\theta} = \frac{-Q_b - Q_u}{\omega} \quad (41)$$

Para expressar o calor perdido em termos da temperatura é necessária a introdução de um coeficiente de troca térmica hc , que a partir da equação de Newton para transferência convectiva de calor (Lounici *et al.*, 2010, p.8) gera as seguintes expressões:

$$Q_b = hc A_b (T_b - T_w) \quad (42)$$

$$Q_u = hc A_u (T_u - T_w) \quad (43)$$

Nestas equações, o coeficiente de troca térmica deve ser avaliado para determinar as trocas térmicas que ocorrem em cada ciclo do motor. No presente trabalho, dois modelos foram utilizados para estimar o coeficiente de troca térmica para zona queimada (h_b) e não queimada (h_u). Inicialmente, utilizou-se o modelo de *Woschni*, que se expressa da seguinte maneira para a zona queimada e não queimada, respectivamente:

$$h_b = hc_b C_{0w} \left[B^{-0,2} P^{0,8} \left((C_{1w} V_{mp}) + C_{2w} \frac{V_d T_1}{P V_1} (P - P_m) \right)^{0,8} T_b^{-0,53} \right] \quad (44)$$

$$h_u = hc_u C_{0w} \left[B^{-0,2} P^{0,8} \left((C_{1w} V_{mp}) + C_{2w} \frac{V_d T_1}{P V_1} (P - P_m) \right)^{0,8} T_u^{-0,53} \right] \quad (45)$$

Nestas equações, C_{0w} é uma constante com valor entre 110 e 130 e C_{1w} e C_{2w} são dados conforme mostra a Tabela 4. Butsworth (2002) utiliza os valores de h_{cb} e h_{cu} como fatores de ajuste do modelo, com valores próximos a unidade, e que podem ser ajustados conforme a necessidade de adequar o modelo a dados experimentais.

Tabela 4 - Valores de C1 e C2 na correlação de Woschni. Fonte: Lounici *et al.*, 2010, p. 10.

Fase	C_{1w} (adimensional)	C_{2w} (m/s.K)
Admissão-Exaustão	6,18	0
Compressão	2,28	0
Combustão-Expansão	2,28	$3,24 \times 10^{-3}$

É conveniente lembrar que o presente modelo avalia os eventos de compressão, combustão e expansão no ciclo, de modo que as constantes de *Woschni* para admissão e exaustão não foram utilizadas. O valor da pressão na ausência de queima (*motored pressure*, P_m) pode ser encontrada pela relação politrópica (Heywood, 1988, p. 385):

$$P_m = P_1 \left(\frac{V_1}{V} \right)^k \quad (46)$$

Na equação (46), P_1 e V_1 correspondem a pressão e o volume inicial do cilindro, correspondentes a pressão no coletor de admissão e ao PMS, respectivamente. O expoente k - para processos de compressão e expansão - assume o valor de 1,3.

Em um segundo momento, devido à elevada sensibilidade do modelo de *Woschni* a variações nas condições iniciais, o que ocasionava dificuldades de convergência do modelo, optou-se por utilizar a correlação de *Hohenberg* como método de cálculo do coeficiente de troca térmica. Esta modificação melhorou significativamente o grau de convergência do modelo (o tempo de simulação diminuiu de cerca de 2 minutos para menos de 30 segundos) e gerou simulações mais próximas dos resultados experimentais. A correlação de *Hohenberg* para as duas zonas é:

$$h_b = hc_b C_1 V^{-0,06} P^{0,8} T_b^{-0,4} (C_2 + v_{mp})^{0,8} \quad (47)$$

$$h_u = hc_u C_1 V^{-0,06} P^{0,8} T_u^{-0,4} (C_2 + v_{mp})^{0,8} \quad (48)$$

Nestas equações, as constantes são $C_1 = 130$ e $C_2 = 1,4$. No modelo proposto, estas constantes são estimadas para cada fase do ciclo (vide a seção “Resultados e Discussões”). O parâmetro V_{mp} é a velocidade média do pistão (em m/s), e é dada por $V_{mp} = 2LN$, onde L é o percurso do pistão e N a rotação em *rpm*.

As variáveis A_b e A_u na equação (42) e (43) representam a área do gás queimado e não queimado em contato com as paredes do cilindro a temperatura T_w . Ferguson (1986, p. 171) define as seguintes funções empíricas para representar estas áreas:

$$A_b = \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) x^{1/2} \quad (49)$$

$$A_u = \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) (1 - x)^{1/2} \quad (50)$$

A fração do cilindro em contato com o gás queimado é assumida como sendo proporcional a raiz quadrada da fração mássica queimada para refletir o fato de que, devido à diferença de densidade entre o gás queimado e não queimado, o gás queimado ocupa uma fração de volume maior do cilindro do que o gás não queimado. Inicialmente convencionou-se por também estimar o valor do expoente de x nas equações (49) e (50), a fim de verificar a influência deste nas simulações, contudo, esta influência mostrou-se desprezível. Isto foi constatado porque, ao considerar o expoente igual à unidade, o diagrama de pressão simulado apresentou o mesmo comportamento que o diagrama obtido utilizando a proporção quadrática, com uma diferença de apenas 0,4% no valor da pressão máxima.

3.7 Solução numérica

Reorganizando os termos da equação (5) de forma que todas as derivadas sejam funções do ângulo de virabrequim, da pressão e da temperatura do gás queimado e não queimado, temos as seguintes expressões:

$$\frac{dP}{d\theta} = f_1(\theta, P, T_b, T_u) \quad (51)$$

$$\frac{dT_b}{d\theta} = f_2(\theta, P, T_b, T_u) \quad (52)$$

$$\frac{dT_u}{d\theta} = f_3(\theta, P, T_b, T_u) \quad (53)$$

Da mesma forma, é conveniente integrar simultaneamente expressões para o trabalho produzido, o calor perdido e a entalpia perdida:

$$\frac{dW}{d\theta} = f_4(\theta, P) \quad (54)$$

$$\frac{dQ_l}{d\theta} = f_5(\theta, P, T_b, T_u) \quad (55)$$

$$\frac{dH_l}{d\theta} = f_6(\theta, P, T_b, T_u) \quad (56)$$

Combinando as derivadas das equações (47) a (52) com as equações de propriedades termodinâmicas previamente discutidas, temos, por fim, as seis seguintes equações diferenciais ordinárias para serem integradas:

$$\frac{dP}{d\theta} = \frac{A+B+C}{D+E} \quad (57)$$

$$\frac{dT_b}{d\theta} = \frac{-h \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) x^{1/2} (T_b - T_w)}{\omega m C_{pb} x} + \frac{v_b}{C_{pb}} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \left(\frac{A+B+C}{D+E} \right) + \frac{h_u - h_b}{x C_{pb}} \left[\frac{dx}{d\theta} - (x - x^2) \frac{C}{\omega} \right] \quad (58)$$

$$\frac{dT_u}{d\theta} = \frac{-h \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) (1 - x^{1/2}) (T_u - T_w)}{\omega m C_{pu} (1 - x)} + \frac{v_u}{C_{pu}} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \left(\frac{A+B+C}{D+E} \right) \quad (59)$$

$$\frac{dW}{d\theta} = P \frac{dV}{d\theta} \quad (60)$$

$$\frac{dQ_l}{d\theta} = \frac{h}{\omega} \left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right) \left[x^{1/2} (T_b - T_u) + (1 - x^{1/2}) (T_u - T_w) \right] \quad (61)$$

$$\frac{dH_l}{d\theta} = \frac{Cm}{\omega} \left[(1 - x^2) h_u + x^2 h_b \right] \quad (62)$$

Onde:

$$A = \frac{1}{m} \left(\frac{dV}{d\theta} + \frac{VC}{\omega} \right) \quad (63)$$

$$B = h \frac{\left(\frac{\pi b^2}{2} + \frac{4V}{b} \right)}{\omega m} \left[\frac{v_b}{C_{pb}} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} x^{1/2} \frac{T_b - T_w}{T_b} \dots \right. \\ \left. + \frac{v_u}{C_{pu}} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} (1 - x^{1/2}) \frac{T_u - T_w}{T_w} \right] \quad (64)$$

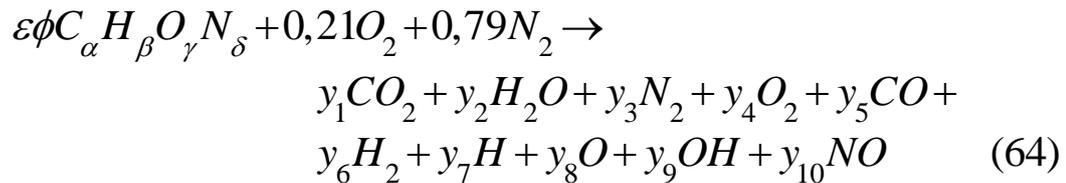
$$C = -(v_b - v_u) \frac{dx}{d\theta} - v_b \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \frac{h_u - h_b}{C_{pb} T_b} \left[\frac{dx}{d\theta} - \frac{(x - x^2) C}{\omega} \right] \quad (65)$$

$$D = x \left[\frac{v_b^2}{C_{pb} T_b} \left(\frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln T_b} \right)^2 + \frac{v_b}{P} \frac{\partial \ln v_b}{\partial \ln P} \right] \quad (66)$$

$$E = (1 - x) \left[\frac{v_u^2}{C_{pu} T_u} \left(\frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln T_u} \right)^2 + \frac{v_u}{P} \frac{\partial \ln v_u}{\partial \ln P} \right] \quad (67)$$

3.8 Composição dos produtos de combustão

Para determinação da composição dos produtos usa-se o modelo de equilíbrio químico apresentado por Ferguson (1986, p.121), que considera que para $\phi < 3$ as únicas espécies de relevância devido à dissociação são o O, H, OH e NO. Desta forma, considera-se a seguinte reação de equilíbrio:



Um balanço atômico fornece as seguintes equações:

$$C = \varepsilon\phi\alpha = (y_1 + y_5)N \quad (65.1)$$

$$H = \varepsilon\phi\beta = (2y_2 + 2y_6 + y_7 + y_9)N \quad (65.2)$$

$$\begin{aligned} O &= \varepsilon\phi\gamma + 0,42 \\ &= (2y_1 + y_2 + 2y_4 + y_5 + y_8 + y_9 + y_{10})N \end{aligned} \quad (65.3)$$

$$N = \varepsilon\phi\delta + 1,58 = (2y_3 + y_{10})N \quad (65.4)$$

Onde $y_N = \sum_{i=1}^{10} y_i$, e por definição:

$$\sum_{i=1}^{10} y_i - 1 = 0 \quad (66)$$

A introdução de seis constantes de equilíbrio confere consistência ao sistema, pois assim temos onze equações para as dez frações molares y_i e para o número de mols N . As reações de dissociação e suas respectivas constantes de equilíbrio são mostradas na Tabela 5.

A resolução destas equações é feita mediante o método desenvolvido por Olikara e Borman (1975 apud FERGUSON, 1986, p. 122), que ajustaram curvas a

partir de dados de equilíbrio das tabelas *JANAF*, obtendo uma expressão geral da seguinte forma:

$$\log K_p = A_1 \ln(T/1000) + A_2/T + A_3 + A_4 T + A_5 T^2 \quad (67)$$

Onde a temperatura é expressa em Kelvin. Os valores das constantes para faixa de $600 < T < 4000\text{K}$ estão contidas no Apêndice C.

Tabela 5 - Equações de equilíbrio que expressam o efeito da dissociação em diferentes espécies.

$\frac{1}{2}H_2 \rightleftharpoons H$	\rightarrow	$K_1 = \frac{y_1 P^{1/2}}{y_6^{1/2}}$
$\frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons O$	\rightarrow	$K_2 = \frac{y_8 P^{1/2}}{y_4^{1/2}}$
$\frac{1}{2}H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons OH$	\rightarrow	$K_3 = \frac{y_9}{y_4^{1/2} y_6^{1/2}}$
$\frac{1}{2}O_2 + \frac{1}{2}N_2 \rightleftharpoons NO$	\rightarrow	$K_4 = \frac{y_{10}}{y_4^{1/2} y_3^{1/2}}$
$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons H_2O$	\rightarrow	$K_5 = \frac{y_2}{y_4^{1/2} y_6 P^{1/2}}$
$CO + \frac{1}{2}O_2 \rightleftharpoons CO_2$	\rightarrow	$K_6 = \frac{y_1}{y_5 y_4^{1/2} P^{1/2}}$

As expressões para as constantes de equilíbrio podem ser rearranjadas para expressar a fração molar de todas as espécies em termos de y_3 , y_4 , y_5 e y_6 , as frações molares de N_2 , O_2 , CO e H_2 , respectivamente.

$$y_7 = c_1 y_6^{1/2} \quad \text{onde } c_1 = K_1 / P^{1/2} \quad (68.1)$$

$$y_8 = c_2 y_4^{1/2} \quad \text{onde } c_2 = K_2 / P^{1/2} \quad (68.2)$$

$$y_9 = c_3 y_4^{1/2} y_6^{1/2} \quad \text{onde } c_3 = K_3 \quad (68.3)$$

$$y_{10} = c_4 y_4^{1/2} y_3^{1/2} \quad \text{onde } c_4 = K_4 \quad (68.4)$$

$$y_2 = c_5 y_4^{1/2} y_6 \quad \text{onde } c_5 = K_5 P^{1/2} \quad (68.5)$$

$$y_1 = c_6 y_4^{1/2} y_5 \quad \text{onde } c_6 = K_6 P^{1/2} \quad (68.6)$$

O número de moles pode ser eliminado do conjunto de equações pela divisão das equações (65.2) até (65.4) pela equação (65.1):

$$2y_2 + 2y_6 + y_7 + y_9 - \frac{\beta}{\alpha}(y_1 + y_5) = 0 \quad (69)$$

$$2y_1 + y_2 + 2y_4 + y_5 + y_8 + y_9 + y_{10} - \left[\left(\gamma + \frac{0,42}{\varepsilon\phi} \right) \frac{1}{\alpha} (y_1 + y_5) \right] = 0 \quad (70)$$

$$2y_3 + y_{10} - \left[\left(\delta + \frac{1,58}{\varepsilon\phi} \right) \frac{1}{\alpha} (y_1 + y_5) \right] = 0 \quad (71)$$

Pela substituição das equações (68.1) até (68.6) nas equações (69) até (71) em conjunto com a equação (66) obtém-se um sistema com quatro equações e quatro variáveis desconhecidas: y_3 , y_4 , y_5 e y_6 . Este conjunto de equações é não linear, sendo resolvido pelo método de Newton-Raphson, conforme utilizado originalmente por FERGUSON (1986). As quatro equações podem ser escritas como:

$$f_j(y_3, y_4, y_5, y_6) = 0 \quad j = 1, 2, 3, 4 \quad (72)$$

Uma solução aproximada pode ser obtida a partir dos dados da Tabela 3. Admitindo este vetor como uma primeira aproximação:

$$\left[y_3^{(1)}, y_4^{(1)}, y_5^{(1)}, y_6^{(1)} \right]$$

Que por sua vez é razoavelmente próximo do vetor solução procurado:

$$(y_3^*, y_4^*, y_5^*, y_6^*)$$

A função representada pela expressão (72) pode ser expandida em uma série de Taylor:

$$\Delta y_1 = y_i^* - y_i^{(1)} \quad (73)$$

Negligenciando os termos de segunda ordem e superiores, obtem-se quatro equações que fornecem aproximações para o valor de Δy_i :

$$f_j + \frac{\partial f_j}{\partial y_3} \Delta y_3 + \frac{\partial f_j}{\partial y_4} \Delta y_4 + \frac{\partial f_j}{\partial y_5} \Delta y_5 + \frac{\partial f_j}{\partial y_6} \Delta y_6 \approx 0, \quad j=1,2,3,4 \quad (74)$$

Este conjunto de equações é resolvido através do emprego de eliminação Gaussiana. Usando sucessivas aproximações de forma iterativa, repete-se o processo até que o valor de Δy_i esteja dentro de uma faixa de tolerância:

$$y_i^n = y_i^{n-1} + \Delta y_i, \quad i=3,4,5,6 \quad (75)$$

$$|\Delta y_i| \leq \xi \ll 1 \quad (76)$$

Onde ξ é a tolerância, definida neste trabalho como $\xi = 3 \times 10^{-12}$, como também o fez Buttsworth (2001). No *Matlab*, a equação (74) foi escrita na forma

matricial, de forma que sua solução fornece os valores de Δy_i requeridos na equação (75).

Com a composição conhecida, as propriedades termodinâmicas de interesse – entalpia, entropia, volume específico e energia interna específica – podem ser calculadas por um procedimento iterativo semelhante, onde a temperatura e a pressão também são incluídas como variáveis independentes.

3.9 Parâmetros de desempenho

Os principais parâmetros de desempenho do motor simulados pelo modelo são a potência indicada, o torque indicado, a pressão média efetiva indicada (IMEP) o consumo específico de combustível e a eficiência de conversão do combustível. Ressalvas a parte, utilizaram-se as relações descritas em Heywood (1988, p. 47-55). Em conjunto com estes parâmetros são apresentados o trabalho, a geração de calor e a pressão e temperatura máximas desenvolvidas ao longo do ciclo. Para determinação da potência indicada se usa o trabalho indicado ao longo do ciclo, que no presente caso consiste no trabalho bruto indicado, visto que o trabalho de bombeamento não é quantificado.

$$Pot(kW) = \frac{W_i N}{n_R} \quad (77)$$

O torque indicado é obtido a partir da seguinte relação:

$$Torque(N.m) = \frac{Pot \times 60000}{2\pi RPM} \quad (78)$$

Na equação (77) n_R representa o número de revoluções do virabrequim, que no caso do ciclo Otto corresponde a duas. Para uma determinada massa de combustível, seu consumo específico é encontrado da seguinte forma:

$$spfc_i (g/kWh) = \frac{\dot{m}_{fuel} \times 3600}{Pot} \quad (79)$$

Onde \dot{m}_{fuel} é a taxa mássica de admissão do combustível em (g/s). A equação (79) é usada para calcular o consumo específico da mistura ($spfc_{MIX}$) e do etanol puro presente na mesma ($spfc_{ET}$). O IMEP é encontrado utilizando a relação definida por FERGUSON (1986, p. 176):

$$imep = \frac{W_{exp}}{V_{BDC} - V_{TDC}} \quad (80)$$

Onde W_{exp} é trabalho referente à fase de expansão e o denominador representa o volume percorrido pelo pistão. A eficiência de conversão do combustível, ou rendimento, é calculada segundo a relação fornecida por HEYWOOD (1988, p. 53):

$$\eta_t = \frac{3600}{spfc_i Q_{LHV}} \quad (81)$$

Na equação (81), Q_{LHV} é poder calorífico inferior do combustível, que para o etanol é igual a 26,9 MJ/kg (HEYWOOD, 1988, p. 915).

3.10 Métodos numéricos e computacionais

O modelo aplicado neste trabalho foi originalmente desenvolvido por FERGUSON (1986) através de um conjunto de submodelos desenvolvidos em linguagem *Fortran*. BUTTSWORTH (2002) adaptou estes submodelos no *Matlab* obtendo resultados semelhantes às simulações originais. Estes trabalhos serviram como base para o desenvolvimento do presente modelo, também implementado na plataforma do *Matlab*. A elaboração do modelo e as simulações foram realizadas em um laptop da fabricante Samsung Electronics, munido de um processador AMD E-350 de 1,6 GHz, com memória RAM instalada de 2 GB e rodando em um sistema operacional de 32 bits.

A Figura 25 representa o procedimento adotado para interação entre os dados experimentais e sua utilização para o ajuste e verificação do modelo termodinâmico apresentado anteriormente.

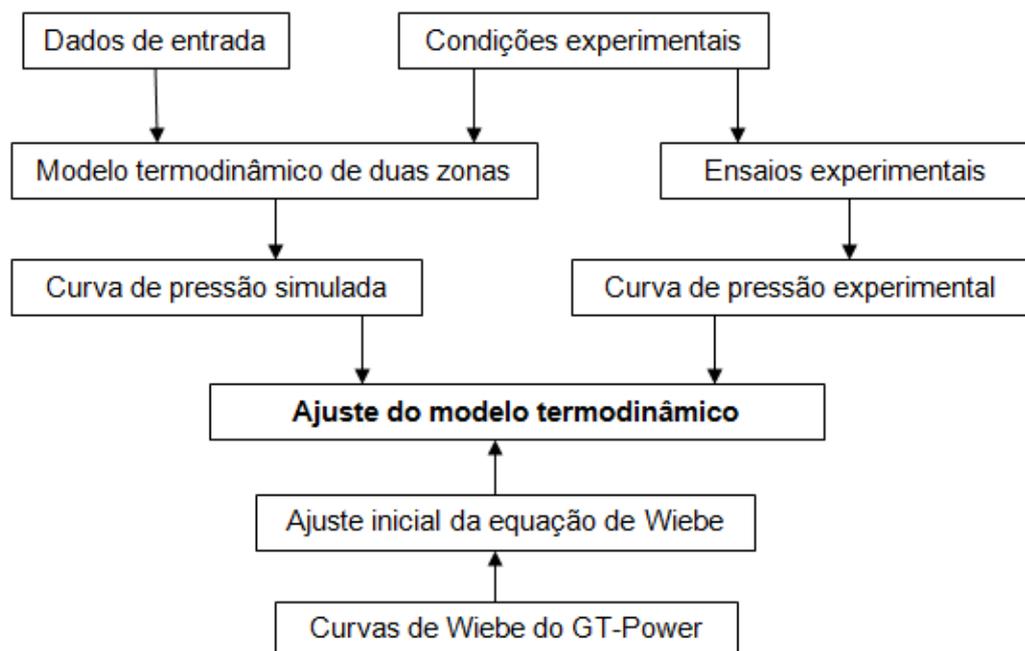


Figura 25 - Procedimento utilizado para ajuste e validação do modelo termodinâmico.

3.10.1 Resolução de EDOs

Para integração numérica das equações diferenciais utilizou-se a função “*ode45*” do *Matlab*, que tem como integrador padrão o método de *Dormand-Prince*, uma das técnicas associadas ao método de *Runge-Kutta* (Dormand *et al.*, 1980). Neste método, a função é avaliada seis vezes para calcular soluções acuradas de quarta e quinta ordem. A diferença entre essas soluções é então tomada como o erro da solução de quarta ordem. O método é efetivo na resolução de equações diferenciais ordinárias (EDOs) de primeira ordem, tais quais as presentes no modelo em questão.

Para interpolar os valores de pressão para um ângulo de amostragem de 0,1 graus, valor menor que o experimental (0,5 graus), utilizou-se a função “*interp1*” do *Matlab*. Nesta função, são encontrados os valores intermediários entre dois pontos do conjunto de dados de uma função unidimensional. Assim, para um conjunto X formado por x_i pontos, a função retorna os valores y_i localizado em um conjunto Y , de mesma dimensão que X (MATHWORKS, 2009). Através da interpolação dos dados de ângulo de virabrequim foi possível garantir uma melhor precisão numérica e estabilidade do método de integração numérica.

3.10.2 Estimação de Parâmetros

A estimação de parâmetros foi realizada através da função “*lsqnonlin*” do *Matlab*, que utiliza a técnica de aproximação por mínimos quadrados não lineares para ajuste de curvas. Nesta técnica, a partir de uma função $f(x)'$ e de um conjunto de dados $f(x)$, é definida uma função objetivo que representa a diferença entre $f(x)'$ e $f(x)$, sendo então realizado um procedimento iterativo a fim de achar o valor mínimo desta diferença.

Na estimativa inicial dos coeficientes a e n da equação de *Wiebe*, equação (34), foi utilizada como base de dados a curva de fração mássica queimada obtida no software GT-POWER, da fabricante *Gamma Technologies*. Neste software, a

fração mássica queimada é gerada a partir da entrada dos dados de pressão do cilindro obtidos experimentalmente. Assim, através do método de mínimos quadrados não lineares, foi gerada uma curva da equação de *Wiebe* que fosse a mais próxima possível da curva obtida no GT-POWER. Em seguida, a partir da curva gerada, se obtia os valores dos coeficientes a e n referentes à regressão.

Para os coeficientes C_1 e C_2 da equação de *Hohenberg*, equações (47) e (48), foram utilizados como estimativas iniciais os valores de $C_1 = 130$ e $C_2 = 1,4$. Os coeficientes a e n obtidos da curva gerada no GT-Power e os valores citados de C_1 e C_2 foram usados como estimativas iniciais para calibrar o modelo de estimação global, onde as equações correspondentes a todos os fenômenos ocorrentes no sistema foram consideradas, de forma a se obter valores definitivos de a , n , C_1 e C_2 .

Após estimar os parâmetros empíricos e realizar a simulação, comparou-se a correlação da curva de pressão simulada com a curva de pressão experimental obtida nos ensaios. Para medir esta correlação, foi utilizada a Integral do Erro Absoluto (ITAE) vezes o ângulo de virabrequim, dada por:

$$ITAE = \int_{\theta=-180^{\circ}}^{\theta=+180^{\circ}} \theta |e(\theta)| d\theta \quad (82)$$

O erro absoluto presente na equação (82) consiste na diferença entre os valores nominais de pressão simulada e da pressão real em um determinado ângulo θ , de forma que valores positivos indicam que a curva de pressão é superestimada pelo modelo enquanto valores negativos indicam uma subestimação da pressão.

4. PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

4.1 Motor de testes

O motor utilizado para realização deste estudo foi um Agrale modelo M-90 originalmente operando em ciclo Diesel, destinado a aplicações industrial, marítima e agrícola. Para avaliar o efeito do etanol super-hidratado em motores ciclo Otto, modificações foram realizadas de modo a adaptar o motor para este ciclo de operação. Dentre as modificações, estão à redução da razão de compressão original de 19:1 para 12:1 (para possibilitar o uso de etanol) através do uso de anéis espaçadores entre o cabeçote e o cilindro; a substituição do filtro de ar por um duto coletor conectado a um corpo de borboleta com TPS (*throttle position sensor*, sensor de posição da borboleta); a instalação de um injetor de combustível comercial no coletor de admissão e de um módulo de injeção eletrônica comercial para controlar a injeção de combustível e o ponto de ignição; e a substituição do bico injetor de Diesel, localizado em uma pré-câmara, por uma vela de ignição. Além disso, para facilitar a partida a frio, foi feito um furo no coletor de admissão para injeção de gasolina. Todas estas modificações são fruto do esforço realizado pela equipe do Laboratório de Motores de Combustão Interna do Centro de Tecnologia da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Santa Maria, RS, Brasil. A Figura 26 mostra o motor comercial original e o Quadro 1 apresenta as principais características técnicas originais e modificadas.



Figura 26 - Motor Agrale M-90 comercial. Fonte: www.linecmotores.com.br

Item	Característica	
	Original	Modificado
Marca/Modelo	AGRALE, M90	
Número de Cilindros	1, vertical	
Deslocamentos por ciclo (tempos)	4	
Ignição	Por compressão	Por centelha
Combustível	Diesel	Etanol hidratado
Sistema de combustão	Injeção direta	Injeção eletrônica no coletor de admissão (PFI)
Refrigeração	a ar forçado	
Diâmetro do Cilindro (mm)	90	
Curso do pistão (mm)	105	
Comprimento da biela (mm)	180	
Relação de compressão	19:1	12:1
Volume deslocado (cm ³)	668	

Quadro 1 - Características do motor: Configuração original x modificada.

4.2 Combustíveis utilizados

Todas as misturas combustíveis de etanol super-hidratado foram preparadas a partir do etanol hidratado coletado na microdestilaria localizada nas dependências do Colégio Politécnico da UFSM. Inicialmente, procedeu-se a caracterização deste etanol a fim de verificar a quantidade de água a ser adicionada na preparação de cada amostra. A composição do etanol hidratado combustível (EHC) obtido em um posto também foi determinada, visto que era este o combustível utilizado na primeira rodada de testes. A caracterização de todas as amostras foi realizada em um densímetro da *Anton Paar* modelo DMA 4500M, ilustrado na Figura 27.

Usando como base o preparo de 2000 mL de cada amostra, adicionou-se água destilada a mistura, levando em consideração a porcentagem de água já presente no etanol de destilaria. A amostra assim sintetizada era então caracterizada no densímetro a fim de verificar sua composição. Admitiu-se um desvio máximo de $\pm 0,5\%$ na concentração volumétrica. Terminado seu preparo, as amostras eram

aconditionadas em garrafas pets de 2 litros lacradas e identificadas de acordo com a composição da mistura, utilizando as seguintes nomenclaturas: E90W10 (10% em volume de água), E80W20 (20% em volume de água), E70W30 (30% em volume de água) e E60W40 (40% em volume de água).

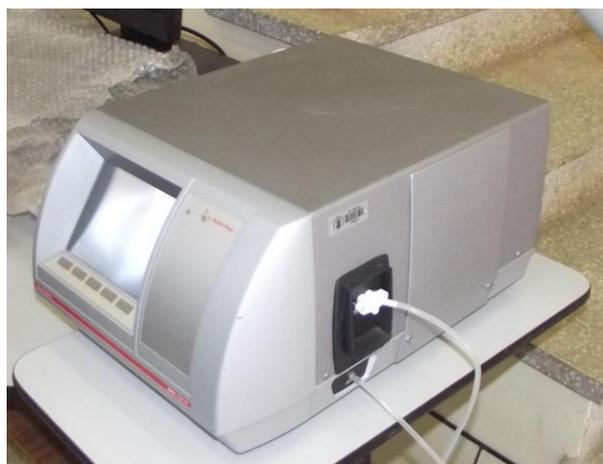


Figura 27 - Densímetro Anton Paar DMA 4500M.

Como o volume de etanol da destilaria (cerca de 40L, acondicionado em um galão) foi suficiente para preparar todas as amostras usadas nos testes, sua caracterização foi realizada uma única vez. A composição do EHC e do etanol de destilaria é mostrada na Tabela 6, enquanto a caracterização das misturas utilizadas em cada teste se encontra nas Tabelas 7 e 8. A caracterização de todas as misturas foi feita sob condições ambientes (1 atm e 20°C).

Tabela 6 - Características do etanol de posto e de destilaria utilizados nos testes.

E95W5	Etanol de posto (EHC)	Etanol de destilaria
Etanol (% volume)	94,82	91,82
Etanol (% massa)	92,15	88,12
Densidade (g/cm ³)	0,81208	0,82070
Temperatura (°C)	20	20

Tabela 7 - Misturas utilizadas no ensaio com torque máximo.

Mistura	<i>E90W10</i>	<i>E80W20</i>	<i>E70W30</i>	<i>E60W40</i>
Concentração etanol (% volume)	89,83	79,77	70,05	59,74
Concentração etanol (% massa)	85,45	73,21	62,43	51,84
Densidade da mistura (g/cm ³)	0,8297	0,8599	0,8854	0,9096

Tabela 8 - Misturas utilizadas no ensaio com ponto de ignição fixo.

Mistura	<i>E90W10</i>	<i>E80W20</i>	<i>E70W30</i>	<i>E60W40</i>
Concentração etanol (% volume)	89,54	80,03	69,68	59,94
Concentração etanol (% massa)	85,00	73,52	62,04	52,04
Densidade da mistura (g/cm ³)	0,8331	0,8591	0,8863	0,9092

4.3 Módulo de injeção eletrônica

Para monitorar os sistemas relacionados ao funcionamento do motor foi utilizado um módulo de controle de injeção e ignição eletrônico, denominado ECU (*eletronic control unit*) modelo Fueltech FT400. Esta ECU é munida de um visor *touchscreen*, por onde é feito todo monitoramento dos parâmetros controlados. Para possibilitar a sincronização da ECU com a fase do motor, um sensor de relutância variável e uma roda dentada de 60 dentes com dois dentes faltantes foram instalados. Uma sonda lambda de banda larga foi instalada para medir a concentração de oxigênio nos gases de escape e assim controlar a relação ar combustível na qual o motor está operando. A Figura 28 apresenta a ECU, com vista do modo de monitoramento (representação). Os parâmetros mostrados na tela da ECU podem ser modificados de acordo com a necessidade do usuário.



Figura 28 - ECU FT400 da FuelTech. Fonte: www.fueltech.com.br

Como a ECU possui sistema de compensação de ponto de ignição e controle injeção de combustível por temperatura do motor e ar de admissão, potenciômetros foram instalados para emular termistores de temperatura do ar de admissão e temperatura do bloco. Assim, tem-se um ajuste do ponto de ignição e tempo de injeção mais rápido do que acessando tais configurações pela interface *touchscreen* da ECU.

4.4. Sistema de frenagem

Para a aplicação de carga, um freio de correntes Foucault da fabricante *Frenelsa* modelo F12-40 EL foi utilizado. O sistema de controle do freio foi desenvolvido na Universidade Federal de Santa Maria. O torque máximo de frenagem é 400 N.m à 3000 rpm, porém a faixa de frenagem máxima foi reduzida para 160 N.m devido à questões relacionadas ao sistema de controle.

O controle de frenagem é manual e apresenta-se em uma escala de frenagem que varia de 0 à 100%. O sistema de frenagem juntamente com o motor é montado em cima de uma estrutura tipo reboque automotivo, com o intuito de possuir maior mobilidade (Figura 29).

A potência do motor é transmitida para o freio por meio de um eixo com duas cruzetas para compensar desalinhamentos, os quais são envoltos por uma proteção de segurança.

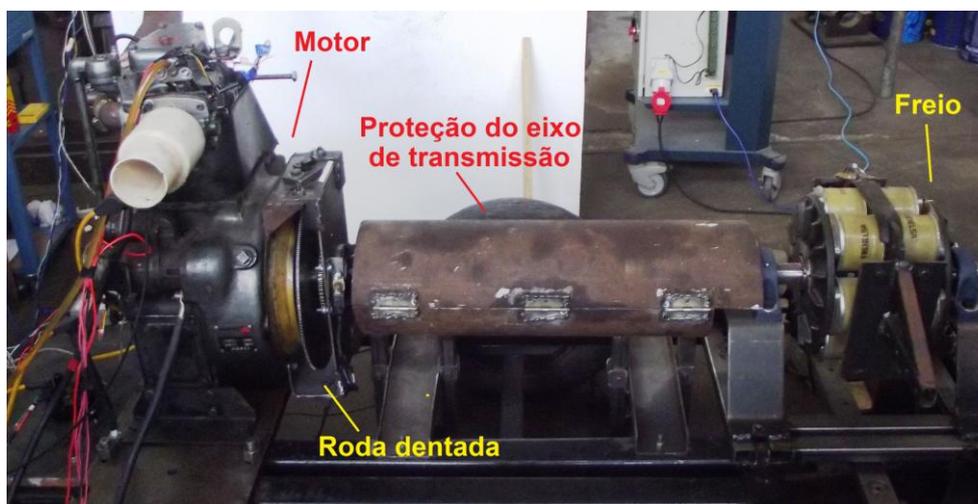


Figura 29 - Motor montado no sistema de frenagem.

4.5 Sistema de medição e alimentação de combustível

Uma vez que o sistema injetor original do motor foi desenvolvido especificamente para injeção de Diesel, uma nova bomba elétrica de combustível comercial utilizada em veículos do tipo *flexfuel* foi instalada para suprir essa necessidade. Na linha de saída da bomba, foi instalado uma válvula reguladora de pressão e um manômetro de maneira a manter a pressão de combustível sempre em valor próximo de 3 bar. A saída da válvula reguladora de pressão foi ligada de volta ao sistema.

Para a medição de consumo de combustível durante os testes, uma bureta de 100 ml foi utilizada antes da bomba de combustível (Figura 30). Com o enchimento da bureta com combustível e a interrupção da linha externa de alimentação foi possível medir o seu consumo volumétrico. Com auxílio de cronômetro, duas medidas de tempo foram tomadas para consumo de 30 ml de combustível em cada teste.

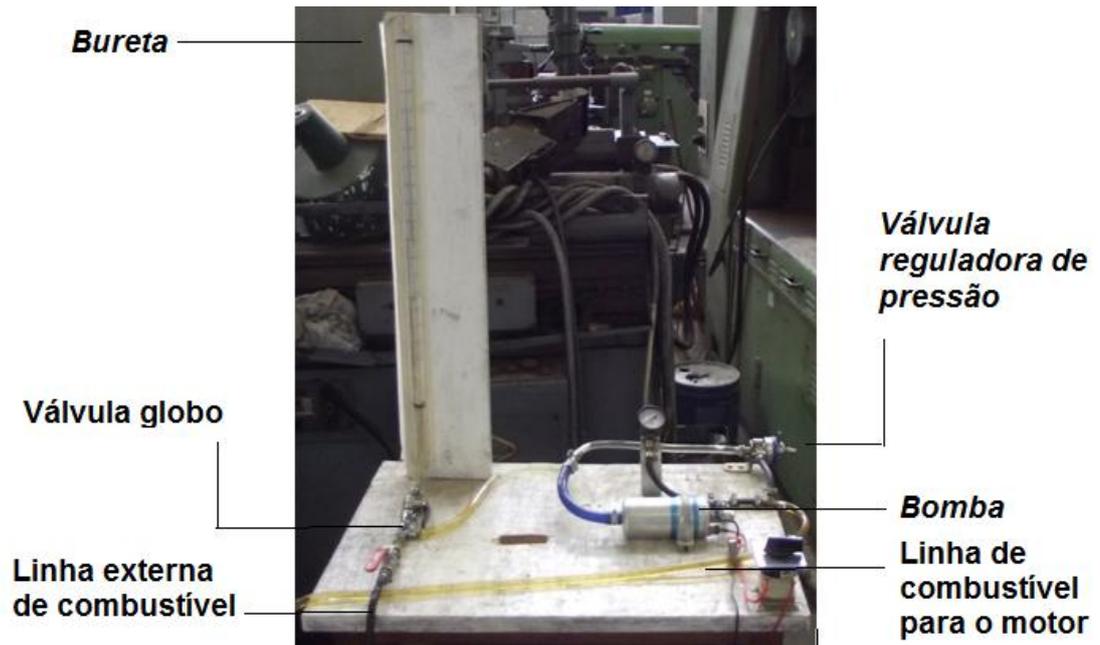


Figura 30 - Sistema de medição e alimentação de combustível.

4.6 Medição de pressão

A pressão no interior do cilindro foi adquirida através de um transdutor de pressão piezoelétrico de ortofosfato de galio (GaPO_4), modelo GH14D da AVL. Transdutores piezoelétricos funcionam a partir do efeito piezoelétrico, no qual uma carga eletrostática é gerada em um cristal como resposta a uma pressão mecânica. Devido à sua natureza de funcionamento, esse tipo de transdutor de pressão não mede pressões estáticas, apenas variações de pressão. Ainda foi instalado junto ao sensor um inibidor de chama, de maneira a aumentar a precisão das medições reduzindo possíveis erros causados por elevadas temperaturas. Especificações de interesse do sensor são mostradas no Quadro 2.

Faixa de medição	0 – 250 bar
Sobrecarga	300 bar
Vida útil	10 ⁸ ciclos de carga
Frequência natural	160 kHz
Faixa de temperatura de operação	-40 – 400°C
Variação do pulso	1,5 mbar/ms
Erro associado	± 0,3 bar

Quadro 2 - Especificações do sensor GH14D. Fonte: www.avl.com (acessado em 17/12/2012).

Para possibilitar o processamento do sinal gerado pelo transdutor de pressão utilizou-se um amplificador de sinal FlexIFEM Piezo da AVL. Este amplificador de sinal, específico para utilização com sensores de pressão piezoelétricos possui sistema integrado para compensação de desvios de medição devido a mudanças bruscas de temperatura, variações cíclicas e interferências elétricas.

Para a medição da pressão nos coletores de admissão e exaustão foram utilizados transdutores de pressão modelo MPX4250AP da fabricante Freescale Semiconductor. Trata-se de sensores piezoresistivos produzidos a partir de uma membrana de silício monolítico. São desenvolvidos para utilização veicular e medem pressão absoluta. Sua faixa de medição varia de 0 até 2,5 bar, apresentando comportamento linear. O erro de medição desse sensor é de precisão é de $\pm 0,05$ bar. Os sensores foram conectados aos locais de medição através de tubos plásticos rígidos e/ou tubos de cobre, a fim de evitar a contaminação com etanol (no sensor do coletor de admissão) e proteger das altas temperaturas do coletor de escapamento.

Para referenciar os valores de pressão ao ângulo do eixo de manivelas utilizou-se uma roda dentada de 360 dentes e um sensor de relutância variável. O princípio de funcionamento desse sensor baseia-se na variação do campo magnético gerada por cada dente da roda dentada, gerando uma tensão de corrente alternada no enrolamento da bobina do sensor ao passar por cada dente. Digitalmente foi possível dividir cada volta do eixo de manivelas em 720 pontos ao identificar os picos e os vales do sinal gerado pelo sensor.

Para referenciar o ponto morto superior e assim realizar a contagem dos ciclos, adicionou-se um marcador ao eixo de manivelas do motor. Utilizou-se um sensor de efeito Hall de maneira que a resposta do sensor coincidissem com o ponto morto superior (*trigger*).

4.7 Medição de temperatura

As medições de temperatura do ar de admissão foram realizadas através de termopares do tipo K. Termopares consistem de dois filamentos de metais diferentes soldados em sua extremidade formando um circuito fechado. A mudança de temperatura gera uma diferença de potencial, a qual é medida e convertida em escala de temperatura. A faixa de temperatura desses sensores é de -200 °C até 1200 °C. A temperatura dos gases de exaustão foi medida por um termopar PT-500 localizado no interior do analisador de gases.

4.8 Análise de gases

A concentração e temperatura dos gases de escapamento foi medida através de um analisador de gases estacionário modelo CMS-7, da fabricante MADUR (Figura 31). O analisador é dotado de sensores infravermelhos não dispersivos (sensores NDIR) para análise de CO. Nestes sensores o gás é acondicionado em uma câmara de amostragem que é irradiada com infravermelho, em seguida incidindo sobre um detector ótico. Desta forma, a absorção de uma faixa específica de comprimento de onda na região do infravermelho permite determinar a concentração do componente nos gases. O equipamento também é dotado de sensores eletroquímicos para análise de hidrocarbonetos não queimados (HC) e NO₂.



Figura 31 - Vista do painel frontal do analisador CMS-7.

A concentração de CO_2 não é obtida por medição direta, mas calculada com base na concentração de O_2 medida no escape e na concentração teórica máxima de CO_2 , que é função do combustível usado. As relações usadas para este cálculo são apresentadas no Anexo A.

A coleta de gases é realizada mediante uma sonda metálica de 300mm que foi conectada ao escapamento do motor através de um orifício na lateral do duto de exaustão. A medição de temperatura é realizada mediante um termopar externo, para medição da temperatura ambiente, e de termopar interno para medição da temperatura do gás (ambos PT-500).

A sonda é ligada a um tubo aquecido (140°C) que conduz o gás para dentro do analisador através de um sistema de serpentina e filtro com a finalidade de separar a água presente nos gases, pois do contrário há chances de danificação dos sensores. A outra extremidade da sonda é conectada ao duto de escapamento do motor. Um cabo SERIAL-USB é usado para transferência de dados do analisador diretamente para um computador pessoal. A plataforma usada para transmissão de dados é o software MADCOM versão 1.2.2, da fabricante MADUR.

As configurações de medida podem ser ajustadas diretamente no display do CMS – 7 ou através do software. Como o etanol não constava no banco de dados foi necessário customizar seus parâmetros de entrada juntamente com as configurações de medida. A descrição destes valores consta na Tabela 9.

Tabela 9 - Configurações de medida e parâmetros de entrada usados nos ensaios.

Configurações de medida					
<i>Taxa de amostragem</i>	<i>O₂ de referência</i>	<i>NO em NO_x</i>	<i>Unidades de medida</i>		
2 segundos	3%	96%	ppm e °C		
Parâmetros de entrada					
<i>Nome</i>	<i>CO_{2máx}</i>	<i>PCI</i>	<i>A1</i>	<i>B</i>	<i>alpha</i>
Etanol	13,11%	26,9 MJ/kg	0,5	0,07	52

O tempo de amostragem de 2 segundos é o menor intervalo no qual o CMS-7 opera e sua escolha decorreu do curto tempo no qual cada rodada com carga no motor de ensaio era realizada (em torno de 1 minuto). O O₂ de referência é o valor usado para calcular a concentração relativa dos componentes e o valor de 3% é o valor padrão estabelecido no software, sendo o mesmo válido para o valor de 96% na concentração de NO em NO_x. Estes valores foram mantidos inalterados. O CO_{2máx} foi calculado conforme o método disposto no Anexo D, enquanto o poder calorífico inferior (PCI) do etanol foi obtido de Heywood (1988, p. 477). O parâmetro A1 e B são chamados de fatores característicos de Siegert (MADUR, 2007, p. 41) e são função do combustível usado, sendo inseridos no cálculo da perda de calor devido ao aquecimento do gás. Por não encontrar os valores correspondentes ao etanol, foram usados os respectivos valores padrões presente no banco de dados do analisador (referentes ao óleo leve). O parâmetro *alpha* é função do estado do combustível, sendo 52 o valor referente a combustíveis líquidos a temperatura ambiente.

4.9 Sistema de aquisição de dados

4.9.1 Sensores de pressão, roda dentada e sonda lambda

Os sinais provenientes dos sensores de pressão, roda dentada, *trigger* e lambda foram adquiridos através de uma placa de aquisição de dados marca *National Instruments* modelo NI USB-6259, com taxa máxima de amostragem de 1,25 MS/s. A taxa de aquisição para cada sinal foi de 130 KHz. A alta taxa de amostragem se fez necessária para possibilitar o processamento do sinal da roda dentada e obtenção de bom referenciamento angular. Para cada dente da roda dentada foi possível associar dois valores instantâneos de pressão, um para o pico e outro para o vale. Assim, é importante salientar que a aquisição de dados foi realizada com base angular. Ressalta-se que a sonda lambda instalada para controle da relação ar-combustível através da ECU também forneceu dados em base angular, sendo calculado o valor médio de cada ciclo.

Como a placa de aquisição de dados possui conexão USB, utilizou-se um computador portátil para realizar a coleta de dados. O software utilizado para coleta foi o LabView Signal Express 2011.

Para processamento dos dados, uma rotina no programa *Matlab* foi desenvolvida. O intuito dessa rotina era dividir individualmente cada ciclo pela referência obtida através do *trigger*. Um algoritmo foi criado para contar o número de picos e vale da roda dentada de 360 dentes dentro de cada ciclo, criando desta maneira uma referência angular.

Um filtro média móvel para intervalo de sete pontos foi utilizado para amenizar a influência de ruídos nos sinais de pressão. Tomou-se cuidado para que o intervalo de dados da média móvel não fosse grande o suficiente para deformar ou defasar o sinal. Após a aplicação do filtro, os sinais de pressão eram então referenciados em base angular para cada pico e vale da roda dentada. Sabendo-se o ponto inicial do ciclo através do sinal *trigger*, conseguiu-se ajustar a fase do sinal.

Em alguns ciclos o sensor de relutância variável instalado para contar os dentes da roda dentada não conseguia detectar todos os dentes devido à alta

vibração característica deste motor monocilíndrico. Assim, alguns ciclos perdiam sinais, o que acabava gerando falta de dados de pressões no final desses ciclos. Como o processamento de dados é feito após a aquisição, não existe maneira de identificar qual a posição exata do dado faltante. Devido à esse problema, o qual é característica da maneira que foi construído esse sistema, para a análise dos sinais de pressão, os ciclos defeituosos foram descartados, e utilizou-se uma média de 40 ciclos completos.

Devido à característica de funcionamento do sensor do transdutor de pressão piezoelétrico medir apenas variações de pressão, se faz necessário o referenciamento em relação a uma pressão absoluta. O valor de referência escolhido no presente trabalho foi a pressão no coletor de admissão no ângulo do PMI do ciclo de admissão. Dessa forma, aplica-se um *offset* na curva de pressão do cilindro para igualá-la à pressão no coletor de admissão no PMI do ciclo de admissão.

4.9.2 Analisador de gases

Os dados do analisador eram transmitidos a um computador pessoal e armazenados em formato *Excel*. Durante a operação com carga máxima, nas medições de consumo, o ponto inicial e final da amostragem era registrado, sendo obtidos em média 35 pontos (correspondente a 70 segundos de amostragem). As medidas de concentração de NO₂ não foram impressas na interface do software, porém eram mostradas no display do analisador. Assim, registrou-se o valor nominal da sua concentração no ponto médio de cada rodada.

Após os ensaios, os dados de emissões para cada mistura combustível eram separados do conjunto geral de dados. A fim de eliminar desvios decorrentes de variações na carga e descarga do motor, convencionaram-se usar 20 pontos intermediários entre estes dois extremos. Por ocorrer eventuais variações entre as medições durante as rodadas, estimou-se o valor do desvio padrão para cada um dos conjuntos de dados ao longo de cada rodada. Aqueles que apresentavam os menores valores de desvio padrão eram adotados como dados representativos.

4.10 Metodologia dos ensaios experimentais

Os ensaios foram realizados no Laboratório de Motores de Combustão Interna, no Prédio 17, localizado no campus da UFSM. Foram realizados dois ensaios, sendo que no primeiro o ponto de ignição foi avançado para obtenção do *maximum brake torque* (MBT) para cada mistura de etanol super-hidratado, até o ponto em que o motor apresentasse mau funcionamento (ruído) ou detonação. No segundo ensaio se utilizou a ignição com ponto fixo (PF) e igual ao maior avanço de ignição possível para o EHC nas condições experimentais estabelecidas.

De forma geral, a metodologia adotada em cada ensaio constituiu-se dos seguintes passos:

- Buscava-se o funcionamento estável do motor na faixa de 1800 RPM com 25% da carga do sistema de frenagem;
- Corrigia-se o λ para o valor mais próximo do estequiométrico;
- Buscava-se o maior avanço de ignição possível para cada mistura (no teste MBT) ou para o EHC (no teste PF);
- Realizavam-se duas medições do tempo de consumo de 30 ml de combustível;
- Retirava-se a carga e reduzia-se a rotação para 1200 RPM por um minuto;
- Repetia-se 3 vezes esse procedimento para cada mistura de etanol super-hidratado;
- Ao final dos testes para cada combustível, realizava-se a mudança de combustível como previamente descrito e recomeçavam-se os testes desde o primeiro passo.

A Figura 32 mostra um diagrama do aparato experimental utilizado. No decorrer dos ensaios, as principais variáveis de interesse obtidas por medição foram:

- A pressão no cilindro ao longo do ciclo;
- Torque de frenagem;
- Temperatura de admissão do combustível e de exaustão dos gases;
- Taxa de consumo de combustível;
- Concentração de CO₂, CO, NO₂ e HC nos gases de escape.

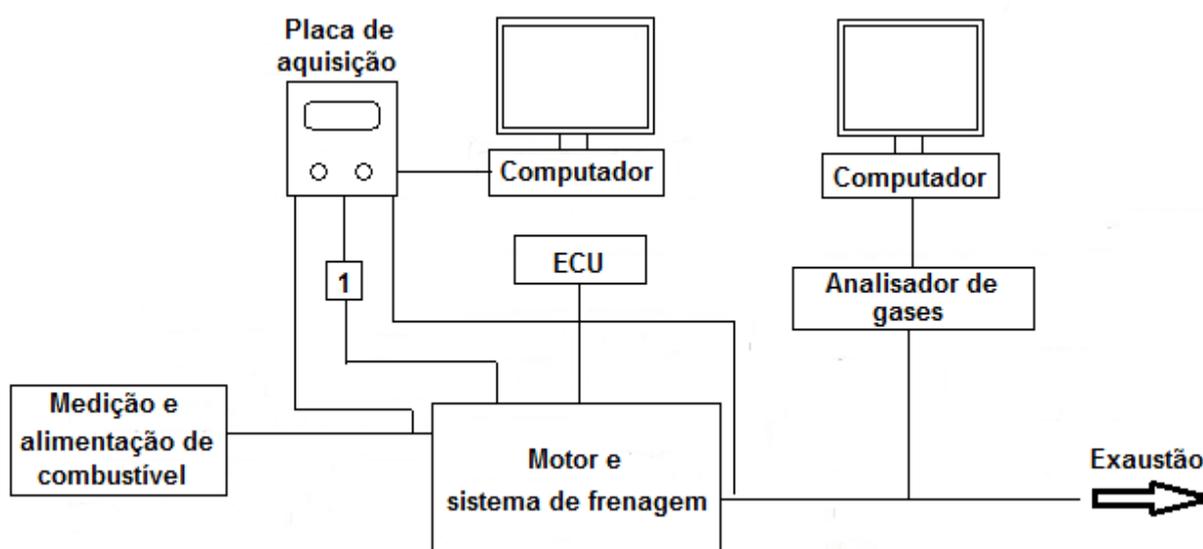


Figura 32 - Esquema do aparato experimental utilizado. A denominação “1” se refere ao amplificador do sinal de pressão.

4.10.1 Procedimento de partida, aquecimento e parada do motor

Durante os ensaios, a partida do motor a frio e a parada do motor, ao final da jornada de testes, foram realizadas com EHC para manter as linhas de combustível em condições operacionais e possibilitar a partida a frio em novos testes. Adicionalmente, a gasolina era utilizada para facilitar o procedimento de partida a frio. A partida a frio com gasolina só era utilizada quando surgiam dificuldades de

partida com o EHC. Ressalta-se que nenhum procedimento especial se fez necessário para a partida do motor em sua fase quente.

O procedimento de aquecimento inicial do motor consistiu em manter a rotação constante entre 1200 e 1300 RPM durante pelo menos dois minutos. Posteriormente a rotação era aumentada para o patamar de 1800 RPM durante mais alguns minutos. Assim, garantia-se o aquecimento completo do motor.

Nas proximidades do fim do ensaio a verificação do óleo denunciava que o mesmo apresentava uma coloração mais clara e espumosa e escoava de forma irregular, indicando que devia ocorrer contaminação com água.

4.10.2 Ensaio de frenagem

Os ensaios em dinamômetro foram realizados através da utilização do freio de Foucault descrito anteriormente. Em todos os testes buscou-se trabalhar na faixa de rotação de 1800 RPM e com mistura próxima do valor estequiométrico ($\lambda = 1$). Para permitir essa condição de operação o motor era acelerado até a faixa de rotação de 2100 RPM e começava-se o processo de frenagem manualmente pela atuação em um potenciômetro ligado ao controlador do freio.

Enquanto a carga imposta sobre o motor era aumentada, abria-se a válvula borboleta através de um acelerador, de fabricação própria, de maneira a não deixar a rotação cair abaixo de 1800 RPM. Como o controle de mistura ar-combustível foi realizado através da ECU, o λ era monitorado diretamente a partir da sua tela. Através do potenciômetro instalado para controlar o λ , aumentava-se ou diminuía-se a duração do pulso de injeção de maneira a manter a mistura o mais próxima possível da razão estequiométrica. A carga máxima imposta sobre o motor em todos os testes foi de 25% da capacidade de frenagem do conjunto "freio e controle", o qual não explorava a máxima capacidade de frenagem do dinamômetro.

É importante salientar que o motor nunca rodou em carga máxima, com a borboleta totalmente aberta, para assegurar sua integridade. Uma vez que o ciclo de operação foi modificado de ciclo Diesel para ciclo Otto, e o sistema de arrefecimento

a ar não teve modificações, este poderia não ter capacidade suficiente de arrefecimento, ocasionando quebras do motor.

4.10.3 Troca de combustíveis e medição da taxa de consumo

A troca de combustível após cada teste e a medição da taxa de consumo foi efetuada com o motor em funcionamento. Para evitar contaminações e garantir que o novo combustível fosse o único na linha de alimentação, adotou-se o seguinte procedimento para troca de combustível:

- 1) Drenava-se todo combustível da linha de alimentação e da bureta (desde o reservatório até a bomba de combustível);
- 2) Adicionava-se o novo combustível através da linha de alimentação até encher a bureta de medição e fechava-se a linha de alimentação de combustível;
- 3) Esperava-se até que todo o volume contido na bureta fosse consumido pelo motor;
- 4) Novamente a bureta era enchida e esperava-se até que todo o conteúdo fosse consumido pelo motor;
- 5) A bureta era enchida, a linha de alimentação fechada, e começavam-se as medições de consumo.

4.10.4 Concentração de gases de exaustão

A análise de gases foi realizada através do analisador CMS-7 descrito anteriormente. Para retirar possíveis resíduos de análises anteriores e zerar os

sensores, o analisador era aspirado com ar atmosférico, sendo ligado 5 minutos antes da partida a frio do motor. Uma vez ligado, os dados eram armazenados em tempo real no banco de dados do software, sendo anotados os intervalos de tempo no qual o motor operava na faixa estável estabelecida (próximo a 1800 rpm e a $\lambda = 1$). Ao final dos ensaios, aspirava-se novamente o analisador por 5 minutos com ar atmosférico para remoção de impurezas que pudessem estar presentes na mangueira e nos sensores.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesta seção são apresentados os dados experimentais dos ensaios e as simulações desenvolvidas. Inicialmente são apresentados os dados operacionais e de emissões medidos nos ensaios do motor em conjunto com a análise das curvas de pressão experimentais. Em seguida são mostradas as simulações realizadas, nas quais constam os gráficos de pressão e temperatura simulada, o diagrama PV e os principais parâmetros de operação obtidos no modelo. Paralelamente, são apresentadas tabelas constando os valores dos coeficientes que foram ajustados pelo método dos mínimos quadrados não lineares. Em seguida a capacidade de predição do modelo é avaliada em conjunto com a observação dos efeitos da crescente fração de água no combustível no desempenho do motor e nas emissões (seção 5.5).

Considerações relevantes das simulações são feitas em relação aos parâmetros de entrada, como a constante de blow-by, que, embora conste no modelo, foi considerada desprezível por ser definida arbitrariamente e não dispor de dados suficientes para sua estimativa. Por um motivo semelhante, a temperatura da parede externa do cilindro foi arbitrada em 420K, o mesmo valor utilizado nas simulações realizadas por Buttsworth (2002).

Os coeficientes hc_u e hc_b presentes na equação (47) e (48) e a fração residual foram modificados de acordo com a necessidade de ajuste do modelo. Os coeficientes foram modificados considerando que $hc_u = hc_b$, sendo varrido o valor no qual o ajuste apresentasse a menor ITAE. Por estarem diretamente relacionados aos cálculos de perda e geração de calor, as alterações destes coeficientes causavam modificações significativas na curva de pressão simulada.

5.1 Resultados experimentais: Ensaio com ponto fixo

5.1.1 Características de operação

Neste ensaio o avanço de ignição foi mantido fixo em 6,5 graus antes do PMS, que correspondia ao torque máximo obtido para o EHC nas condições de ensaio (rotação e λ). Os resultados são mostrados na Tabela 10. Destes, é interessante destacar o crescente valor do consumo volumétrico de combustível conforme a fração de água no combustível aumenta. O valor do torque manteve-se na faixa de 33,5 N.m a 36 N.m.. De forma geral, a temperatura de exaustão dos gases diminuiu com o aumento da fração de água no combustível. Os crescentes valores da temperatura de admissão até o E70W30 são uma provável decorrência da temperatura de operação do ensaio. Uma discussão mais detalhada é realizada na seção 5.5.

Tabela 10 - Condições operacionais estabelecidas e resultados medidos no ensaio com ponto fixo.

<i>Combustível</i>	EHC	E90W10	E80W20	E70W30	E60W40
<i>Rotação (RPM)</i>	1830	1794	1828	1852	1830
λ	1,07	1,06	1,09	1,08	1,09
<i>Ponto de ignição (°BTDC)</i>	-6,5°	-6,5°	-6,5°	-6,5°	-6,5°
<i>Torque (N.m)</i>	33,8	33,5	34	36	35
<i>T adm (°C)</i>	22	23	24	26	25
<i>T exhaust (°C)</i>	581,08	570,25	576,58	573,53	559,86
<i>Consumo (ml/s)</i>	1,16	1,32	1,36	1,62	1,95

A partir dos resultados medidos foi possível calcular a potência efetiva, a taxa mássica de consumo da mistura e do etanol puro, o valor médio de massa admitida no cilindro (ATM, do inglês *Averaged Trapped Mass*) e o consumo específico de combustível (Tabela 11). A potência e a ATM foram calculada através das expressões presentes em Heywood (1988):

$$P(kW) = 2\pi N(\text{rev/s}) \text{Torque}(N.m) \times 10^{-3} \quad (83)$$

$$ATM = \frac{m_f(g/s)}{RPM/60} \quad (84)$$

O consumo específico do etanol puro presente na mistura (spfc_{ET}) e da mistura de etanol super-hidratado (spfc_{MIX}) foi calculado através da divisão do consumo específico mássico (g/h) (obtido através do conhecimento da densidade do combustível, Tabelas 6, 7 e 8) pela potência previamente calculada.

Tabela 11 - Parâmetros calculados a partir dos dados experimentais do ensaio com ponto fixo.

Combustível	EHC	E90W10	E80W20	E70W30	E60W40
Potência efetiva (kW)	6,47	6,29	6,5	6,98	6,7
Consumo - mistura (g/s)	0,946	1,1058	1,1769	1,4396	1,7816
Consumo - etanol (g/s)	0,8748	0,94	0,8653	0,8931	0,9271
ATM - mistura (mg)	31,024	36,986	38,630	46,641	58,413
ATM - etanol (mg)	28,68	31,438	28,401	28,936	30,398
spfc_{ET} (g/kWh)	486,25	537,69	478,6	460,53	497,63
spfc_{MIX} (g/kWh)	516,37	563,33	649,86	721,98	943,31

5.1.2 Emissões

Os valores medidos da concentração de gases no escape são mostrados na Tabela 12. A concentração de NO não foi lida pelo analisador, somente a de NO₂. O mesmo aconteceu para a concentração de CO nas misturas E70W30 e E60W40, a partir das quais o analisador indicou sobrecarga (*overflow*) no sensor e parou de gerar leituras de CO, de modo que não foi mais possível coletar dados de sua concentração.

Tabela 12 - Concentração de gases na exaustão durante o ensaio com ponto fixo.

Combustível	EHC	E90W10	E80W20	E70W30	E60W40
CO ₂ (% volume)	14,8	14,92	15,2	14,66	14,64
CO (ppm)	1881	1870	1858	-	-
NO ₂ (ppm)	38,8	30	36	40	34,83
CH _x (% volume)	0,012	0,0131	0,0165	0,0209	0,0253

5.1.3 Curvas de pressão

As curvas de pressão experimentais obtidas são mostradas na Figura 33. É interessante ressaltar que embora as curvas correspondam aos valores médios para 40 ciclos completos, os dados das fases de admissão ($-360^\circ < \theta < -180^\circ$) e exaustão ($180^\circ < \theta < 360^\circ$) não foram utilizados no presente trabalho, pois o modelo não analisa estas duas fases. Na Tabela 13 são mostrados os valores de pressão para cada mistura de combustível, onde P_1 corresponde a pressão inicial na compressão ($\theta = -180^\circ$), P_4 a pressão final da expansão ($\theta = 180^\circ$) e $CAD_{(p_{máx})}$ ao ângulo no qual ocorre o valor máximo de pressão no cilindro.

Na Figura 33 é interessante notar como o comportamento da curva de pressão nas fases de compressão e expansão são semelhantes entre os

combustíveis, ao contrário do que ocorre na fase de combustão. Este fenômeno é mais bem visualizado na Figura 34, onde é feita uma ampliação da curva na fase de combustão.

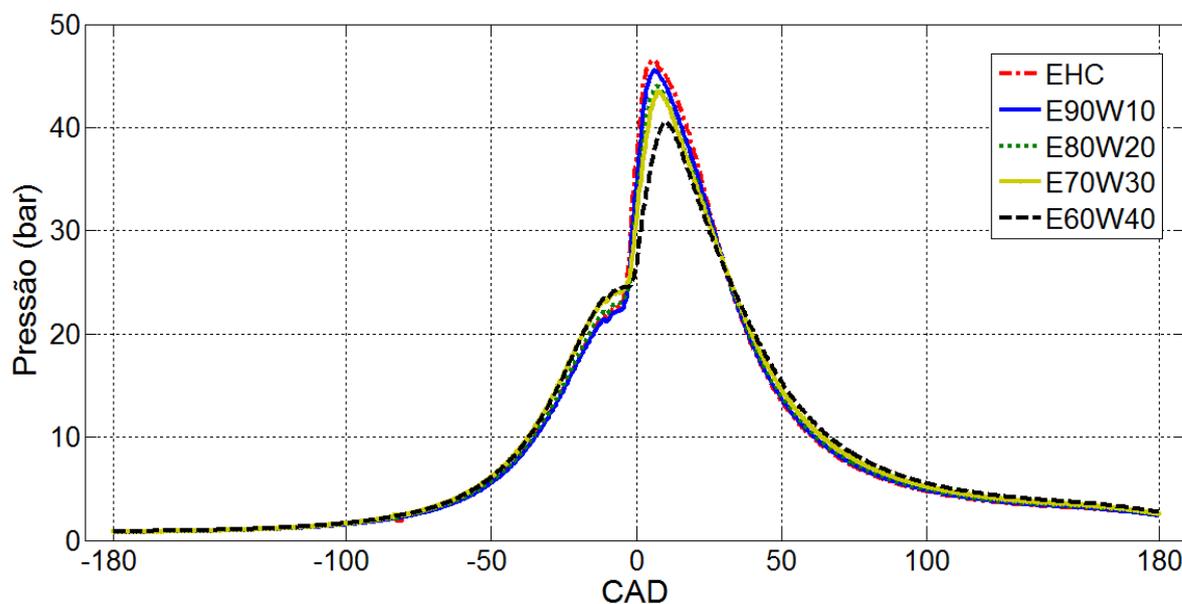


Figura 33 - Curvas experimentais de pressão obtidas no teste com ponto fixo.

Tabela 13 - Principais valores de pressão no cilindro para as misturas de combustível (ensaio com ponto fixo).

	EHC	E90W10	E80W20	E70W30	E60W40
P_1 (bar)	0,79	0,76	0,8	0,84	0,86
$P_{\text{máx}}$ (bar)	46,5	45,5	44	43,4	40,5
$CAD_{(p_{\text{máx}})}$	+6°	+6,5°	+7°	+8°	+10°
P_4 (bar)	2,38	2,38	2,46	2,6	2,73

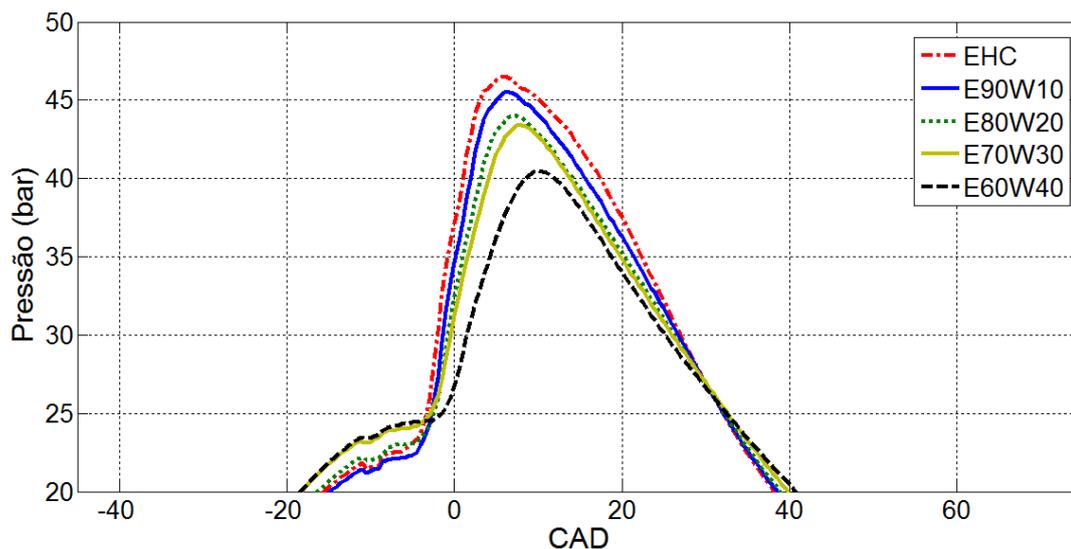


Figura 34 - Pressão no cilindro durante a fase de combustão (ensaio PF).

Na Figura 34, é interessante observar como a inclinação da curva de pressão diminui proporcionalmente ao teor de água presente no combustível, indicando uma maior duração da combustão. Isto implica em menores velocidades de propagação da chama na câmara de combustão, reduzindo consecutivamente o pico de pressão no cilindro. Pode-se deduzir que o alargamento da queima decorre da fração do calor de combustão que é absorvida na forma de calor sensível e latente (este último no caso de existir gotículas de água na mistura). Os dados mostrados na Tabela 13 também denunciam este efeito, como pode ser visto pelo decréscimo do valor da $P_{m\acute{a}x}$ no cilindro e o atraso no ângulo no qual a mesma ocorre ($CAD_{(p_{m\acute{a}x})}$).

5.2 Resultados experimentais: Ensaio MBT

5.2.1 Características de operação

Neste ensaio o ponto de ignição foi ajustado para obtenção do *maximum brake torque* (MBT). Os resultados são mostrados na Tabela 14. Obviamente, a

maior diferença em relação ao ensaio anterior é o ponto de ignição, avançado conforme era aumentada a fração de água no combustível.

A partir dos dados coletados dos ensaios, calculou-se a potência efetiva, o consumo mássico, a ATM da mistura e do etanol e o consumo específico de combustível (g/kWh) (Tabela 15). A metodologia utilizada para estes cálculos foi igual à descrita na seção 5.1.1.

Tabela 14 - Condições operacionais estabelecidas e resultados medidos no ensaio MBT.

<i>Combustível</i>	EHC	E90W10	E80W20	E70W30	E60W40
<i>Rotação (RPM)</i>	1805	1806	1801	1850	1824
λ	1,08	1,11	1,08	1,07	1,11
<i>Ponto de ignição (°BTDC)</i>	-6,5°	-8°	-11°	-16,25°	-20,25°
<i>Torque (N.m)</i>	33,3	33	35	36	33
<i>T adm (°C)</i>	24	26	27	28	29
<i>T exhaust (°C)</i>	578,5	575,1	564,49	550,22	545,8
<i>Consumo (ml/s)</i>	1,11	1,17	1,38	1,57	1,81

Tabela 15 - Parâmetros calculados dos dados experimentais do ensaio MBT.

Combustível	EHC	E90W10	E80W20	E70W30	E60W40
Potência efetiva (kW)	6,29	6,23	6,59	6,97	6,3
Consumo - mistura (g/s)	0,9024	0,9761	1,191	1,398	1,65
Consumo - etanol (g/s)	0,8343	0,8341	0,8719	0,8728	0,8558
ATM - mistura (mg)	29,996	32,429	36,77	45,34	54,303
ATM - etanol (mg)	27,734	27,71	29,048	28,30	28,15
$spfc_{ET}$ (g/kWh)	477,44	481,37	475,77	450,73	489,01
$spfc_{MIX}$ (g/kWh)	525,9	632,58	650,9	742,31	956,24

5.2.2 Emissões

Os resultados da análise de gases são mostrados na Tabela 16. Ressalta-se que este ensaio ocorreu antes do ensaio PF, de modo que o sensor de CO não apresentou quaisquer problemas de leitura.

Tabela 16 - Concentração de gases de escape no ensaio MBT.

Combustível	EHC	E90W10	E80W20	E70W30	E60W40
CO ₂ (% volume)	14,6	14,3	14,63	14,53	14,4
CO (ppm)	2352	2344	2344	2342	2340
NO ₂ (ppm)	33	35	32,3	40	53
CH _x (% volume)	0,096	0,085	0,085	0,071	0,078

5.2.3 Curvas de pressão

Na Figura 35 são mostradas as curvas de pressão experimentais obtidas no ensaio MBT. É importante notar como o comportamento da pressão na fase de combustão difere daquele visto no ensaio com ponto de ignição fixo. Enquanto neste último o valor da pressão máxima diminui com a fração de água presente no combustível, para as condições de MBT a tendência foi à inversa. Até a combustão da mistura E70W30 a pressão máxima no cilindro aumentou continuamente até 53,8 bar, sofrendo um decréscimo na mistura E60W40 (Tabela 17).

Na Figura 36 pode ser vista uma ampliação da curva de pressão na fase de combustão, onde se observa que a inclinação da curva mantém-se aproximadamente constante durante a combustão de todas as misturas. Isto decorre do avanço de ignição, uma vez que o adiantamento da centelha reduz o efeito que o

retardo da queima imposto pela presença da água tem na redução do pico de pressão no cilindro.

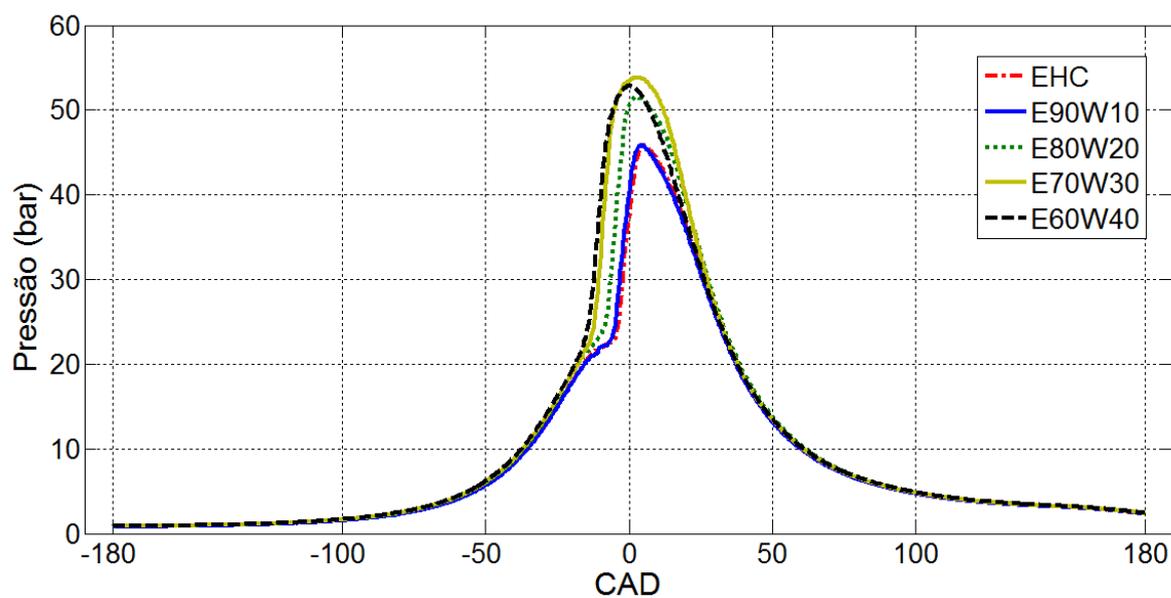


Figura 35 - Curvas experimentais de pressão obtidas no teste MBT.

Tabela 17 - Principais valores de pressão no cilindro para as misturas de combustível (ensaio MBT).

	EHC	E90W10	E80W20	E70W30	E60W40
P_1 (bar)	0,78	0,78	0,84	0,85	0,86
$P_{m\acute{a}x}$ (bar)	45,8	46	51,6	53,8	52,9
$CAD_{(p_{m\acute{a}x})}$	+5°	+4,5°	+2,5°	+1,5°	0°
P_4 (bar)	2,33	2,34	2,43	2,4	2,43

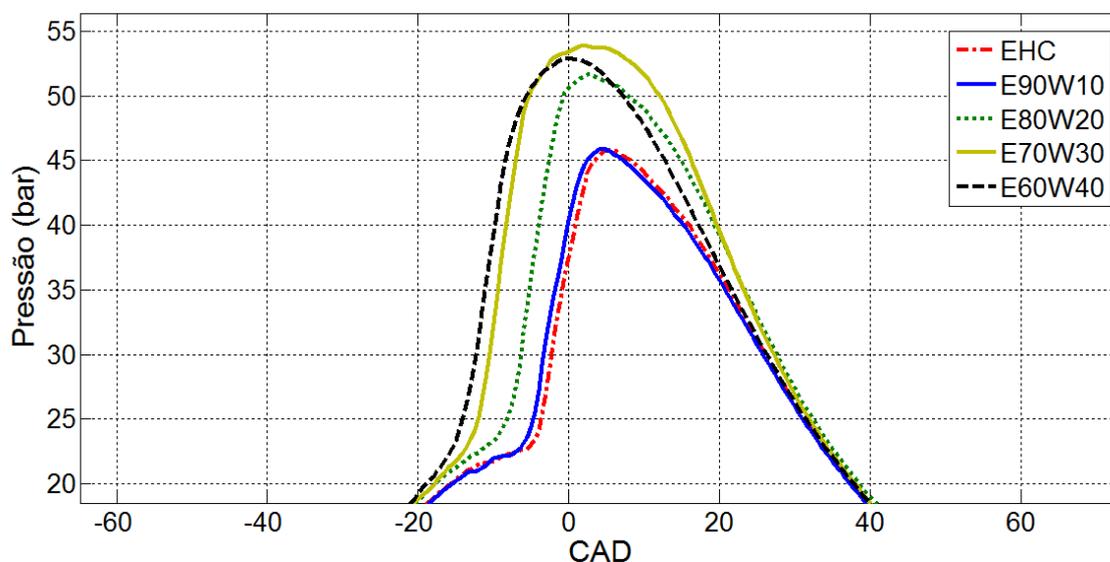


Figura 36 - Pressão no cilindro durante a fase de combustão (ensaio MBT).

5.3 Resultados da simulação: Ponto fixo

5.3.1 Parâmetros de entrada do modelo

Os parâmetros de entrada necessários para realização das simulações consistiram basicamente nas características geométricas do cilindro, nas propriedades do combustível e nas condições iniciais de pressão, temperatura e composição da mistura entre ar, combustível e gases residuais. Na Tabela 18 são mostrados os parâmetros de operação utilizados como entrada nas simulações. A razão de equivalência consiste no valor inverso do λ obtido experimentalmente. A duração da combustão foi obtida a partir das curvas de fração mássica queimada (MFB) geradas no GT-Power. A pressão e temperatura utilizadas como condições iniciais correspondem à condição de início da compressão ($\theta = -180^\circ$), sendo que a pressão deriva dos dados experimentais, enquanto a temperatura inicial é estimada a partir da lei dos gases ideais, sendo ajustada arbitrariamente quando necessário. Como previamente citado, a temperatura da parede externa do cilindro e a constante de blow-by foram mantidas constantes e iguais a 420K e 0, respectivamente.

Como sempre se utilizou o mesmo motor no ensaio, sua geometria e a razão de compressão não variaram. O volume no PMI consiste na soma do volume varrido pelo pistão (cilindrada), do volume da câmara principal e do volume da pré-câmara e do bowl (*cavidade do pistão*), estes dois últimos medidos através de injeção de líquido por meio de uma seringa. Estas características são mostradas na Tabela 19.

Tabela 18 - Parâmetros de operação utilizados nas simulações do ensaio com ponto fixo.

Combustível	E95W5	E90W10	E80W20	E70W30	E60W40
Razão de equivalência	0,93	0,94	0,91	0,92	0,93
Rotação (RPM)	1830	1794	1828	1852	1830
% molar de água	14,59%	26,50%	44,78%	58,16%	68,37%
Ponto de ignição (°BTDC)	-6,5°	-6,5°	-6,5°	-6,5°	-6,5°
Duração da combustão	58,8°	61,9°	64,7°	68,1°	74,4°
Pressão inicial (bar)	0,79	0,77	0,8	0,84	0,86
Temperatura inicial (K)	311	320	325	325	327
Ângulo inicial	-180°	-180°	-180°	-180°	-180°
Temperatura parede externa (K)	420	420	420	420	420
Constante de blow-by	0	0	0	0	0

Tabela 19 – Parâmetros geométricos do motor.

Diâmetro (m)	0,09
Deslocamento (m)	0,105
Comprimento da biela (m)	0,16
Razão de compressão	12
Volume PMI (m ³)	7,236 x 10 ⁻⁴

5.3.2 Estimação de parâmetros

Em conjunto com os parâmetros de entrada foi realizada uma estimação dos principais parâmetros empíricos encontrados nos submodelos aplicados. Estes parâmetros são os coeficientes a e n da equação de *Wiebe* e os parâmetros C_1 e C_2 presentes na equação de *Hohenberg*.

A estimativa de valores únicos de a e n para todo o intervalo abrangido pela curva de MFB obtida no GT-Power mostrou-se insatisfatória, pois os coeficientes obtidos interferiam no ajuste posterior da curva de pressão e eram incapazes de prever a mudança de comportamento no início da combustão. Contudo, a peculiaridade deste comportamento, com um trecho inicial aproximadamente linear (denominado de “Wiebe 1”) e posteriormente adquirindo características exponenciais (“Wiebe 2”), permitiu que a estimativa fosse feita separadamente em cada um destes intervalos (Figura 37). Desta maneira, os coeficientes obtidos referentes ao termo linear da curva (a_1 e n_1) e ao termo exponencial (a_2 e n_2) foram utilizados como condições iniciais no ajuste posterior da curva de pressão simulada e permitiram uma melhor correlação com os dados experimentais. Os valores de a e n obtidos como condições iniciais são mostrados na Tabela 20.

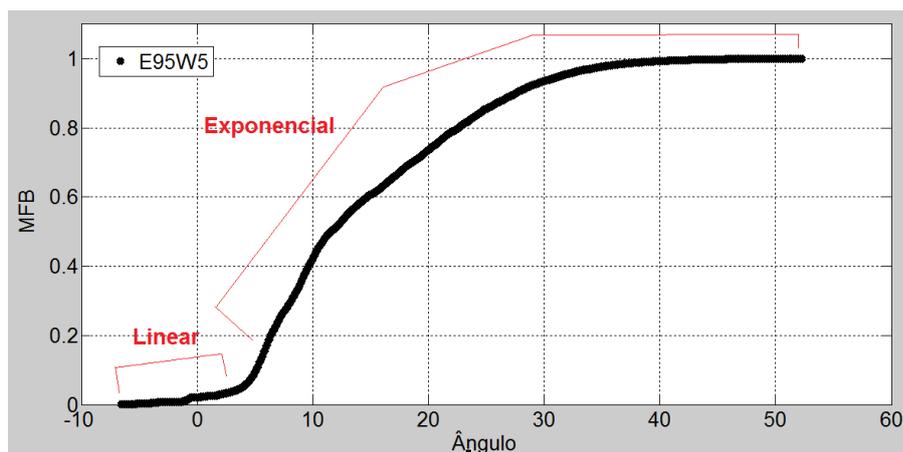


Figura 37 - Curva de fração mássica queimada gerada no GT-Power para o E95W5 no ensaio PF.

Tabela 20 - Valores iniciais de a e n estimados no ensaio com ponto fixo.

	Wiebe 1		Wiebe 2		Wiebe 1		Wiebe 2	
	θ_i	θ_f	θ_i	θ_f	a1	n1	a2	n2
E95W5	-6,5°	3,7°	3,8°	52,3°	0,0574	2,7278	5,7183	0,104
E90W10	-6,5°	3,4°	3,5°	55,5°	0,0472	4,7219	5,6297	0,1372
E80W20	-6,5°	4°	4,1°	58,2°	0,0466	3,6119	5,4043	0,13
E70W30	-6,5°	4°	4,1°	61,7°	0,0426	4,8458	5,0135	0,158
E60W40	-6,5°	5,3°	5,4°	67,9°	0,0461	2,8178	5,0351	0,1655

Embora os coeficientes C_1 e C_2 da equação de Hohenberg sejam comumente referenciados como $C_1 = 130$ e $C_2 = 1,4$ (LOUNICI *et al.*, 2010; CHIODI, 2011), seus valores, a exemplo da correlação de *Woschni*, foram avaliados separadamente para cada fase do ciclo, sendo que estas constantes foram consideradas como chutes iniciais no método dos mínimos quadrados não lineares. Na Tabela 21 são mostrados os resultados da estimação para o EHC e as misturas de combustível usadas no ensaio PF.

Tabela 21 - Coeficientes estimados para as misturas de etanol super-hidratado no ensaio com ponto fixo.

Parâmetro	C1	C2	a1	n1	a2	n2	
EHC	Compressão	114,27	6,84	-	-	-	-
	Combustão	124,25	30,3	9,999	0,792	2,161	0,508
	Expansão	110	0,33	-	-	-	-
E90W10	Compressão	110	0,33	-	-	-	-
	Combustão	124,14	30,7	9,999	0,867	2,185	0,58
	Expansão	110	0,33	-	-	-	-
E80W20	Compressão	110,05	0,44	-	-	-	-
	Combustão	123,9	26,08	9,83	0,964	2,144	0,631
	Expansão	110	0,33	-	-	-	-
E70W30	Compressão	110,06	0,71	-	-	-	-
	Combustão	123,94	55,04	7,503	0,81	1,853	0,482
	Expansão	112,88	14,68	-	-	-	-
E60W40	Compressão	114,27	6,84	-	-	-	-
	Combustão	124,26	30,3	9,998	0,829	2,549	0,412
	Expansão	111,97	10,17	-	-	-	-

5.3.3 Simulação do EHC

A Figura 38 mostra o diagrama de pressão simulada versus experimental do EHC. O valor da ITAE na simulação foi de -120,31, o que constitui um erro diminuto devido ao grande número de pontos de integração (igual a 720, visto que a pressão varia de $\theta = -180^\circ$ até $\theta = 180^\circ$ com um passo de $0,5^\circ$).

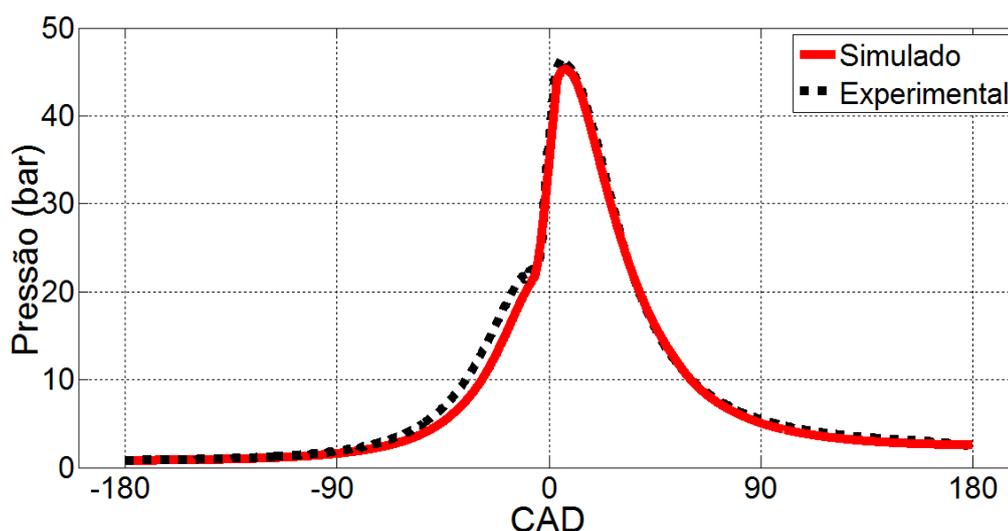


Figura 38 - Diagrama de pressão simulada versus experimental para o EHC no ensaio PF.

Na fase de compressão a curva simulada subestima os valores experimentais de pressão. Modificações nas condições iniciais de pressão e temperatura, nos valores de hc_u , hc_b e na fração residual não alteram este resultado. Uma provável razão disto pode derivar do fato de que, a uma mesma temperatura e pressão, o volume específico da água no estado gasoso tende a ser maior que do etanol. Isto está ilustrado na Figura 39, onde é comparado o volume específico do etanol e da água encontrados através dos dados de pressão e temperatura gerados na simulação do EHC. Como foi admitido o pressuposto de que a água encontra-se totalmente vaporizada no início da compressão, isto pode implicar que o volume específico da mistura entre ar, combustível e gases residuais é menor do que o calculado pelo modelo, o que, segundo a lei dos gases ideais, resulta em valores maiores de pressão. O fato de esta ocorrência ser notada na simulação da fase de compressão de todas as misturas combustíveis torna este fato ainda mais evidente.

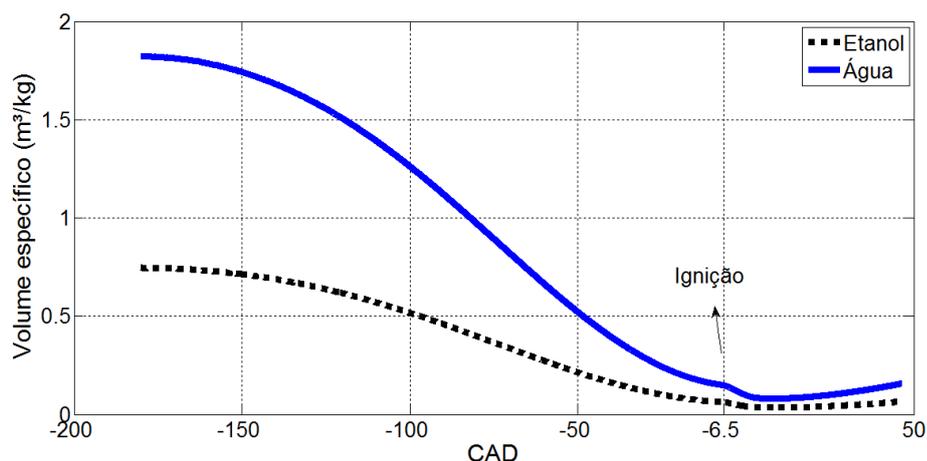


Figura 39 - Volume específico da água e do etanol nas fases de compressão e combustão do EHC (MBT).

Uma vez obtida a curva de pressão simulada foi possível estimar outras variáveis de interesse no sistema, como a temperatura dos gases queimados e não queimados ao longo do ciclo, o calor liberado e o trabalho gerado, o diagrama PV e os parâmetros de desempenho e de operação (Figuras 40 e 41 e Tabela 22). Os parâmetros de desempenho incluem o trabalho, torque e potência indicados, o calor liberado pelo combustível, o consumo específico de etanol ($spfc_{ET}$) e da mistura ($spfc_{MIX}$), a pressão e temperatura máximas estimadas no cilindro e a eficiência de conversão do combustível. Em conjunto, são mostrados os coeficientes hc_u e hc_b ajustados, bem como a fração residual.

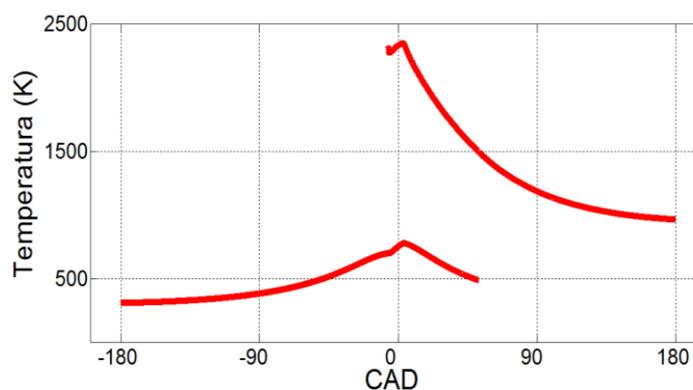


Figura 40 - Gradiente de temperatura no cilindro obtido na simulação do EHC (PF).

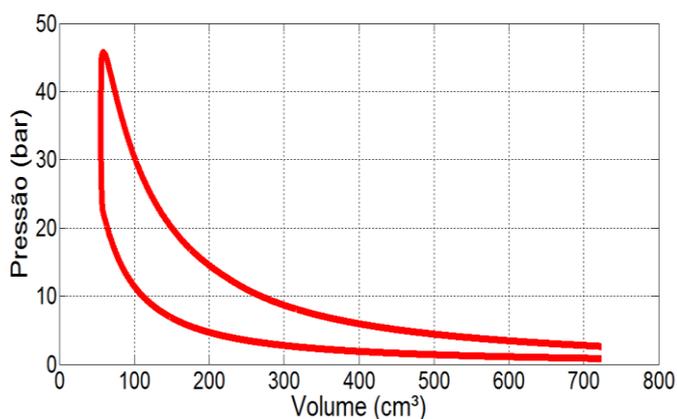


Figura 41 - Diagrama PV obtido na simulação com o EHC (PF).

Tabela 22 - Parâmetros obtidos da simulação do EHC (PF).

<i>Q_{in}</i> (J)	1471,9	<i>Spfc_{ET}</i> (g/kWh)	460,71
<i>Temperatura máxima</i> (K)	2400	<i>Spfc_{MIX}</i> (g/kWh)	498,28
<i>Pressão máxima</i> (bar)	45,6	<i>Rendimento</i>	0,2905
<i>IMEP</i> (bar)	6,71	<i>Fração Residual</i>	8%
<i>Trabalho indicado</i> (J)	448,28	<i>hc_u</i>	2
<i>Potência indicada</i> (kW)	6,83	<i>hc_b</i>	2
<i>Torque indicado</i> (N.m)	35,67	<i>ITAE</i>	-120,31
<i>Perda de calor</i> (J)	685,92	<i>Tempo de simulação</i> (s)	16,53

5.3.4 Simulação das misturas de etanol super-hidratado

A simulação do ciclo para as misturas de etanol super-hidratado seguiram o mesmo procedimento das realizadas para o EHC, salvo modificações nas condições iniciais e de operação. Todas as curvas de pressão simuladas subestimaram o valor de pressão na fase de compressão e a pressão máxima no cilindro. A causa destes erros pode estar associada ao fato de que as condições iniciais (pressão,

temperatura e composição) assumidas pelo modelo no início da combustão correspondem às condições do fim da compressão, que por sua vez estão defasadas dos valores experimentais devido à pré-condição imposta de vaporização total do combustível. A seguir são apresentados os resultados gráficos para simulação de cada combustível (Figura 42 a 46).

a) E90W10

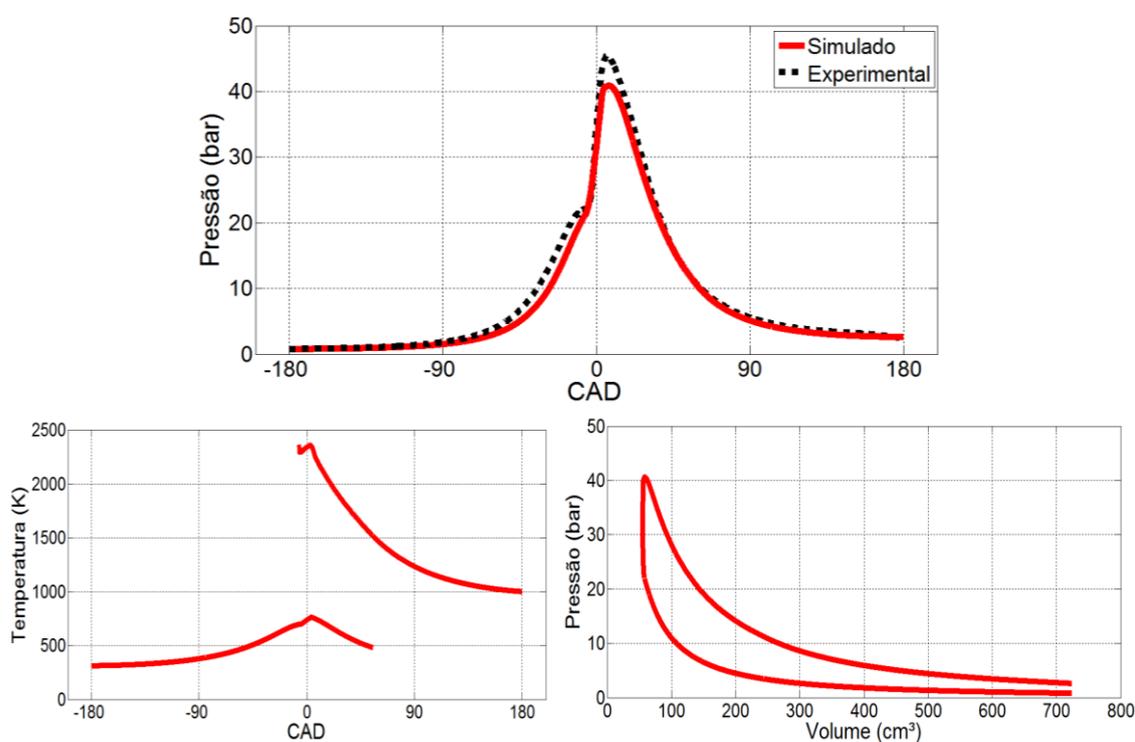


Figura 42 - Pressão, temperatura e diagrama PV obtidos na simulação do E90W10 (ponto fixo).

b) E80W20

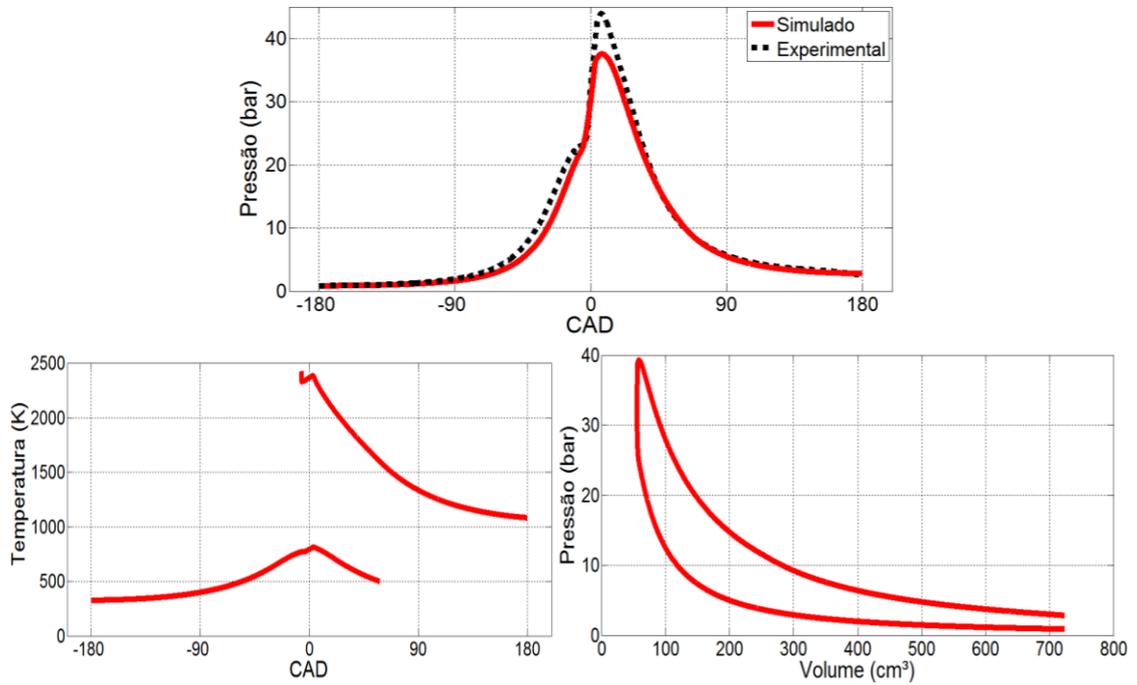


Figura 43 - Pressão, temperatura e diagrama PV obtidos na simulação do E80W20 (ponto fixo).

c) E70W30

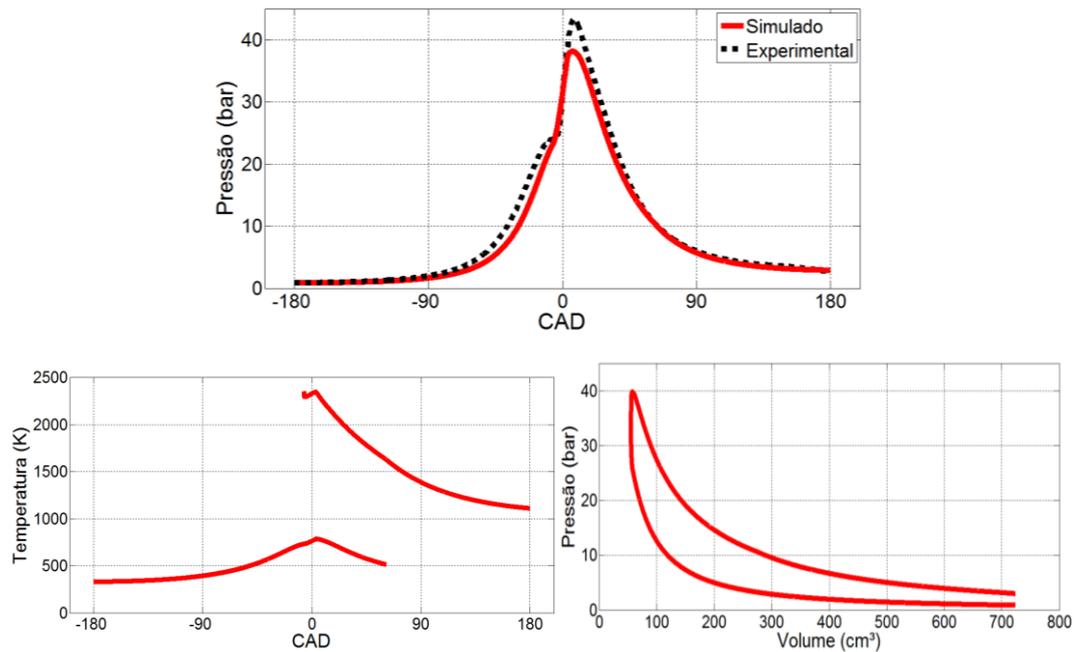


Figura 44 - Temperatura e diagrama PV obtidos na simulação do E70W30 (ponto fixo).

d) E60W40

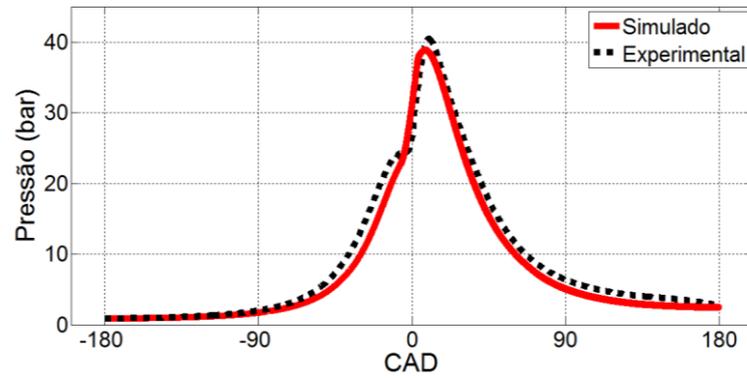


Figura 45 - Pressão obtida na simulação do E70W30 (ponto fixo).

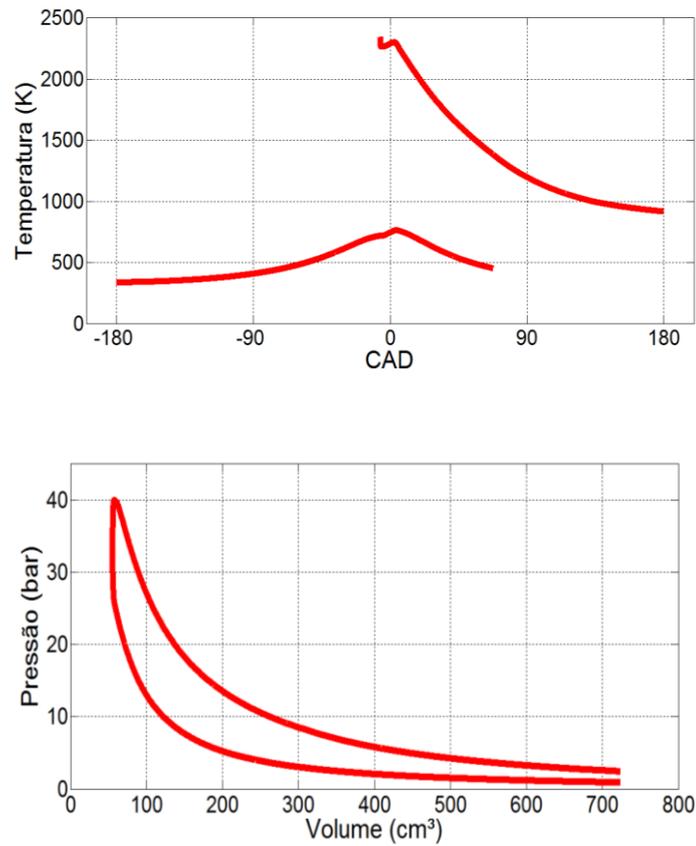


Figura 46 - Temperatura e diagrama PV obtidos na simulação do E60W40 (ponto fixo).

Na Tabela 23 são mostrados os principais parâmetros obtidos das simulações juntamente com a ITAE, a fração residual e os coeficientes hc_u e hc_b . É interessante notar como a ITAE aumenta gradativamente com o grau de hidratação do combustível até alcançar o valor razoavelmente alto de 8509,8 no E60W40.

Tabela 23 - Principais parâmetros obtidos nas simulações com ponto de ignição fixo.

Combustível	E90W10	E80W20	E70W30	E60W40
<i>Q_{in} (J)</i>	1473,3	1561,3	1516,1	1529,6
<i>Temperatura máxima (K)</i>	2360	2355	2349	2330
<i>Pressão máxima (bar)</i>	40,9	37,9	39	39,1
<i>IMEP (bar)</i>	6,56	6,68	6,8	6,35
<i>Trabalho indicado (J)</i>	438,8	446,51	454,71	424,23
<i>Calor perdido (J)</i>	669,73	646,36	478,3	701,93
<i>Potência indicada (kW)</i>	6,56	6,8	7,01	6,47
<i>Torque indicado (N.m)</i>	34,91	35,53	36,18	33,76
<i>spfc_{ET} (g/kWh)</i>	515,83	457,96	449,708	515,92
<i>spfc_{MIX} (g/kWh)</i>	606,86	622,91	738,52	991,36
<i>Rendimento</i>	0,26	0,292	0,297	0,259
<i>Fração Residual (% molar)</i>	6,5	4	6,5	6
<i>hc_u</i>	2	2,1	0,8	1,7
<i>hc_b</i>	2	2,1	0,8	1,7
<i>Tempo de simulação (s)</i>	14,77	14,04	15,97	15,5
<i>ITAE</i>	969,02	-1032,4	-2313,8	8509,8

5.4 Simulações: MBT

5.4.1 Parâmetros de entrada no modelo

As características geométricas do motor utilizadas nas simulações com a condição de MBT permaneceram as mesmas descritas na Tabela 18, página 116. Entretanto, os parâmetros de operação diferiram, conforme é mostrado na Tabela 24.

Tabela 24 - Parâmetros de operação utilizados nas simulações do ensaio MBT.

Combustível	E95W5	E90W10	E80W20	E70W30	E60W40
Razão de equivalência	0,92	0,9	0,92	0,93	0,9
Rotação (RPM)	1805	1806	1801	1850	1824
% molar de água	14,59%	26,50%	44,78%	58,16%	68,37%
Ponto de ignição (°BTDC)	-6,5°	-8°	-11°	-16,5°	-22,3°
Duração da combustão	53,1°	56,4°	52,9°	55,3°	68,7°
Pressão inicial (bar)	0,79	0,78	0,84	0,86	0,86
Temperatura inicial (K)	311	324	325	325	327
Ângulo inicial	-180°	-180°	-180°	-180°	-180°
Temperatura parede externa (K)	420	420	420	420	420
Constante de blow-by	0	0	0	0	0

5.4.2 Estimação de parâmetros

Na Tabela 25 é mostrada a estimação inicial dos coeficientes da equação de *Wiebe*. A Tabela 26 mostra os coeficientes finais resultantes da estimação.

Tabela 25 - Estimativa inicial dos coeficientes da equação de Wiebe (MBT).

	Wiebe 1		Wiebe 2		Wiebe 1		Wiebe 2	
	θ_i	θ_f	θ_i	θ_f	a	n	a	n
E95W5	-6,5°	3,7°	3,8°	46,6°	0,0451	2,8775	5,3818	0,2271
E90W10	-8°	3°	3,1°	48,5°	0,0499	2,7175	5,0141	0,1751
E80W20	-11°	-2°	-1,9°	41,9°	0,0349	8,8104	4,544	0,5025
E70W30	-16,5°	-4°	-3,9°	38,8°	0,0451	5,3510	3,8866	0,2763
E60W40	-22,3°	-8°	-7,9°	46,4°	0,0419	5,4739	3,9939	0,3068

Tabela 26 - Coeficientes estimados para as misturas de etanol super-hidratado no ensaio MBT.

Parâmetro	C ₁	C ₂	a ₁	n ₁	a ₂	n ₂	
EHC	Compressão	112,09	6,175	-	-	-	-
	Combustão	123,89	27,5	7,659	0,694	1,729	0,589
	Expansão	110	0,33	-	-	-	-
E90W10	Compressão	112,13	6,28	-	-	-	-
	Combustão	123,99	27,68	7,647	0,723	1,77	0,592
	Expansão	110	0,33	-	-	-	-
E80W20	Compressão	112,41	7,06	-	-	-	-
	Combustão	123,97	27,64	7,607	0,671	1,777	0,592
	Expansão	110	0,33	-	-	-	-
E70W30	Compressão	112,41	7,06	-	-	-	-
	Combustão	123,97	27,64	7,607	0,671	1,778	0,593
	Expansão	110	0,33	-	-	-	-
E60W40	Compressão	115,28	21,88	-	-	-	-
	Combustão	126,31	55,68	8,849	0,499	2,142	0,749
	Expansão	110	0,33	-	-	-	-

5.4.3 Simulação para o EHC

Assim como nas condições de ensaio com ponto de ignição fixo, a simulação do motor com EHC apresentou uma correlação melhor que a maioria das misturas de etanol super-hidratado. Novamente ocorreu uma subestimação da pressão na fase de compressão. Os gráficos da simulação são mostrados na Figura 47 e os principais parâmetros de desempenho na Tabela 27.

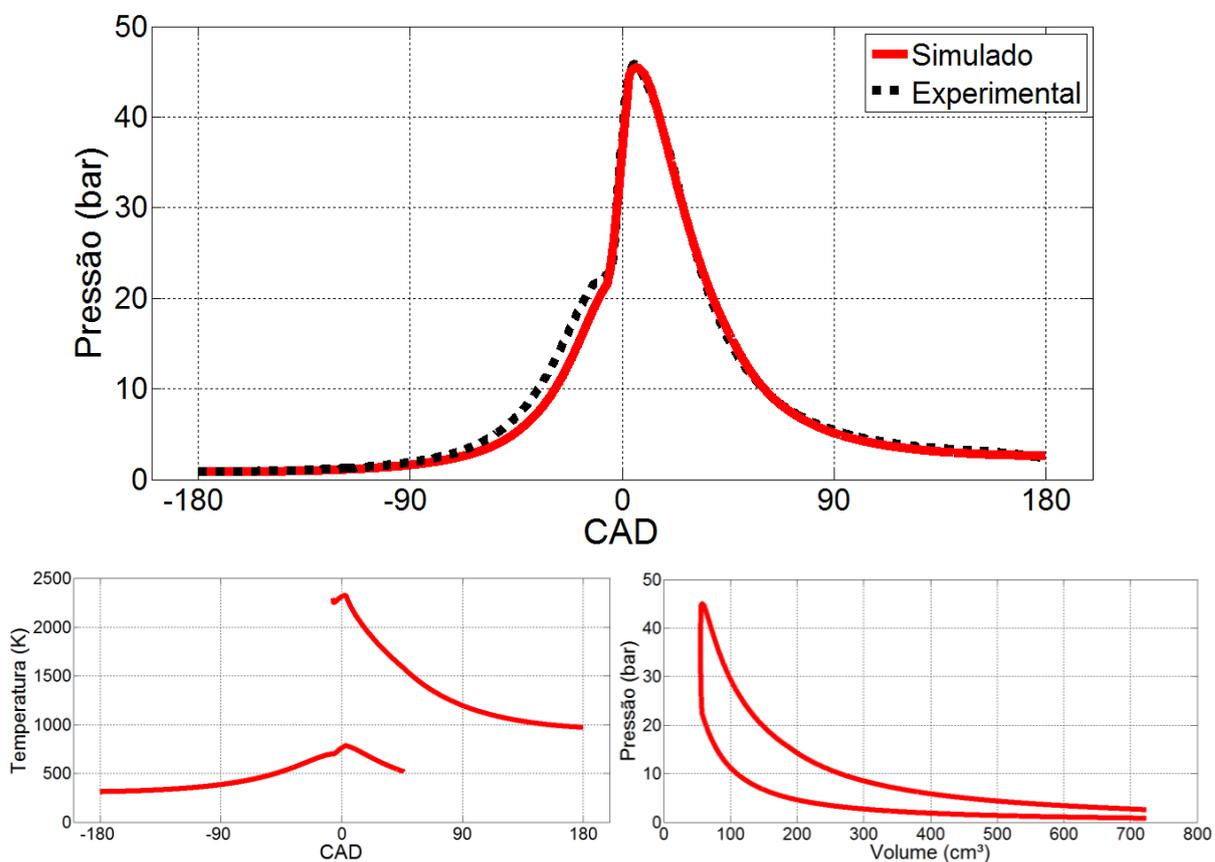


Figura 47 - Pressão, temperatura e diagrama PV simulados para o EHC (MBT).

Tabela 27 - Principais parâmetros obtidos na simulação do EHC (MBT).

<i>Q_{in}</i> (J)	1495,4	<i>spfc_{ET}</i> (g/kWh)	452,29
<i>Temperatura máxima</i> (K)	2330	<i>Spfc_{MIX}</i> (g/kWh)	489,18
<i>Pressão máxima</i> (bar)	45,4	<i>Rendimento</i>	0,296
<i>Trabalho indicado</i> (J)	450,64	<i>Fração Residual</i>	8%
<i>Potência indicada</i> (kW)	6,77	<i>hc_u</i>	2
<i>IMEP</i> (bar)	6,74	<i>hc_b</i>	2
<i>Torque indicado</i> (N.m)	35,86	<i>ITAE</i>	-1218,2
<i>Calor perdido</i> (J)	629,38	<i>Tempo de simulação</i> (s)	13,16

5.4.4 Simulação das misturas de etanol super-hidratado

As simulações realizadas com as condições do ensaio MBT geraram resultados satisfatórios até a simulação da mistura E80W20. Para as misturas E70W30 e E60W40 o modelo subestima o pico de pressão no cilindro. A seguir são mostrados os principais resultados gráficos obtidos (Figura 48 a 52).

a) E90W10

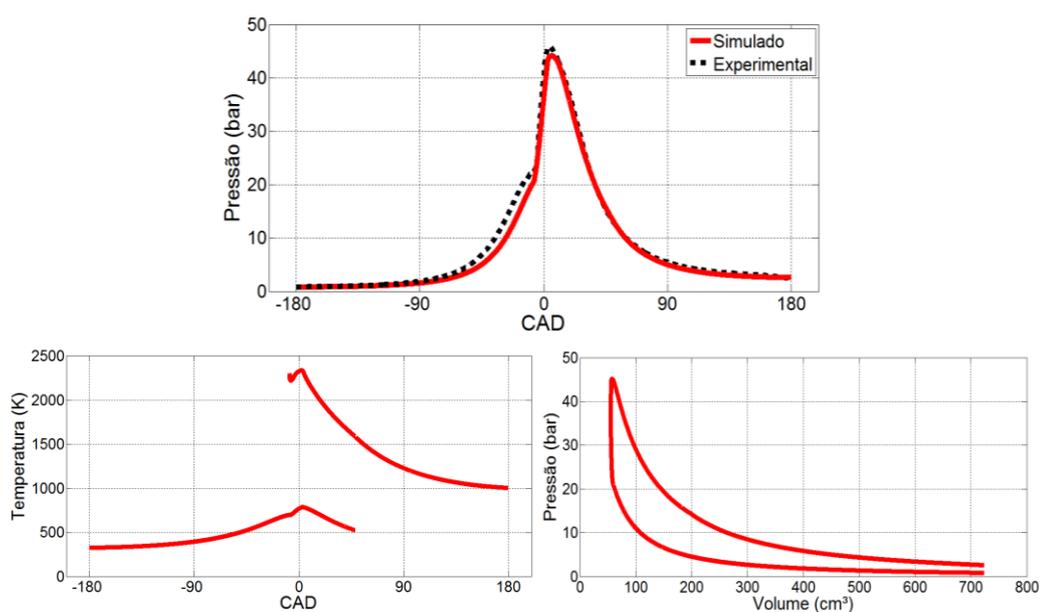


Figura 48 - Pressão, temperatura e diagrama PV simulados para o E90W10 (MBT).

b) E80W20

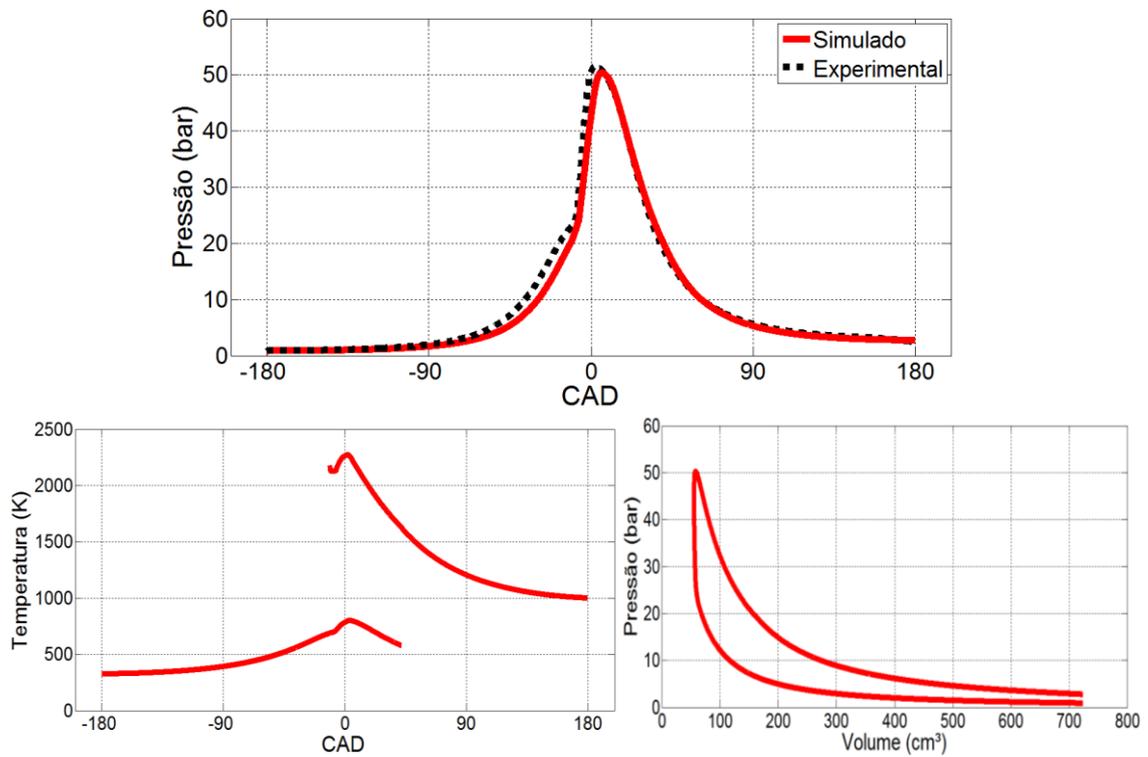


Figura 49 - Pressão, temperatura e diagrama PV simulados para o E80W20 (MBT).

c) E70W30

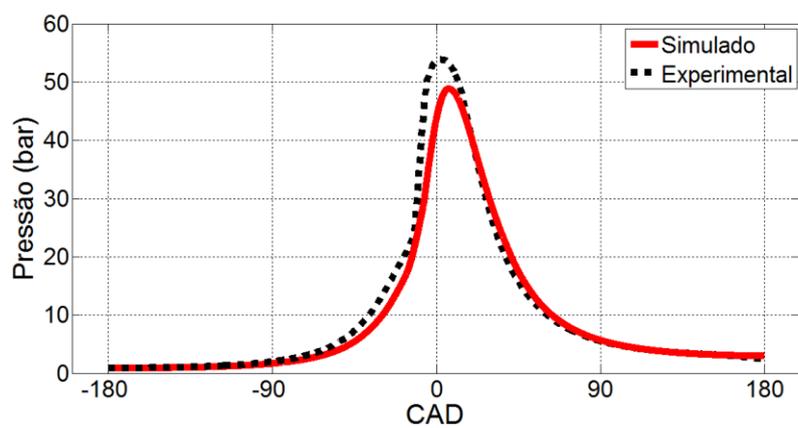


Figura 50 - Pressão simulada para o ensaio E70W30 (MBT).

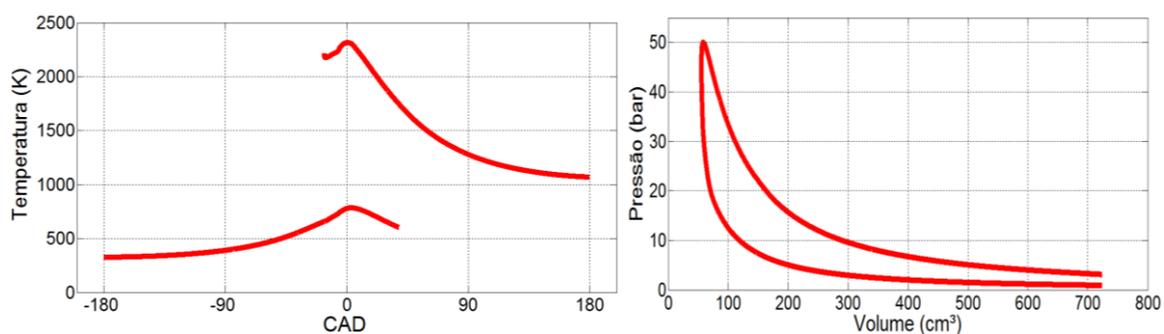


Figura 51 - Temperatura e diagrama PV simulados para o E70W30 (MBT).

d) E60W40

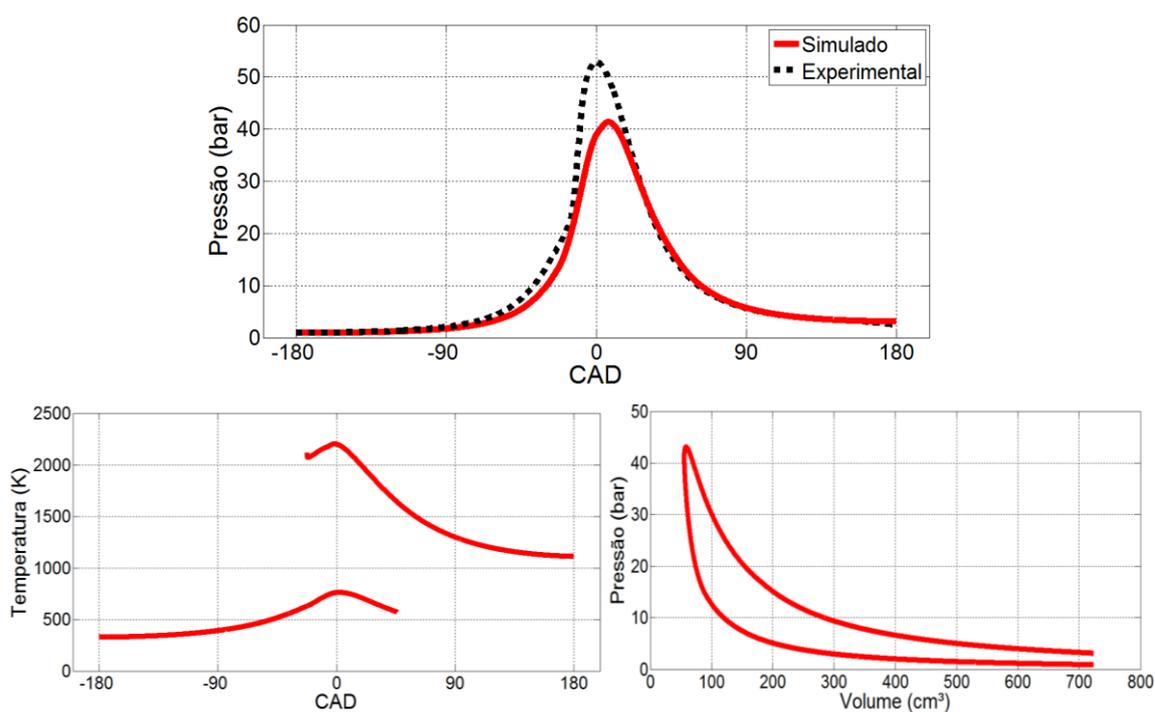


Figura 52 - Pressão, temperatura e diagrama PV simulados para o E60W40 (MBT).

Na Tabela 28 são apresentados os principais parâmetros obtidos nas simulações da combustão de etanol super-hidratado nas condições de torque máximo. É interessante notar como os coeficientes hc_u e hc_b são ajustados para valores gradualmente menores à medida que o combustível apresenta maior

hidratação. Também é importante observar como a ITAE novamente aumenta em função do teor de água. Na seção 5.5 será explicado o fator que causa este aumento consecutivo do erro nas simulações.

Tabela 28 - Principais parâmetros das simulações (MBT).

Combustível	E90W10	E80W20	E70W30	E60W40
<i>Q_{in} (J)</i>	1487,8	1536,8	1652,1	1650,2
<i>Temperatura máxima (K)</i>	2343	2273	2290	2205
<i>Pressão máxima (bar)</i>	44,4	50,3	47,9	41,4
<i>IMEP (bar)</i>	6,5	7,16	7,09	6,76
<i>Trabalho indicado (J)</i>	434,54	478,53	473,93	452,16
<i>Calor perdido (J)</i>	568,42	496,33	552,97	434,24
<i>Potência indicada (kW)</i>	6,54	7,18	7,3	6,87
<i>Torque indicado (N.m)</i>	34,58	38,08	37,71	35,98
<i>Spfc_{ET} (g/kWh)</i>	459,13	437,05	429,92	449,22
<i>Spfc_{MIX} (g/kWh)</i>	537,32	553,24	688,79	866,57
<i>Rendimento</i>	0,291	0,306	0,311	0,297
<i>Fração Residual (% molar)</i>	4	8	4	4
<i>h_{cu}</i>	1,8	1,4	1,5	0,7
<i>h_{cb}</i>	1,8	1,4	1,5	0,7
<i>ITAE</i>	-687,72	-1522,5	-2083,3	-3574,8
<i>Tempo de simulação (s)</i>	15,53	16,86	16,7	13,8

5.5 Comparação entre os resultados

Os dados experimentais, em conjunto com os dados gerados nas simulações expostas nas seções 5.3 e 5.4 podem ser utilizados para observar o comportamento dos parâmetros de operação do motor em função da fração de água no combustível. Como as perdas mecânicas não puderam ser quantificadas, o torque e a potência

útil, medidos no dinamômetro, não puderam ser preditos pelas simulações. No modelo, estas variáveis se referem ao volume de controle no interior do cilindro, sendo medidas indicadas de desempenho (torque indicado, potência indicada e consumo específico indicado). Entretanto, uma observação no comportamento dos parâmetros de desempenho do motor permite verificar, além da influência da água na sua operação, a capacidade do modelo de prever variações no desempenho em função do combustível utilizado.

5.5.1 Potência

Na Figura 53 é mostrada a potência experimental e a potência simulada em função da fração de água no combustível. Os crescentes valores da ITAE sugerem que o valor da potência simulada tende a ser subestimado. Isto pode ser notado, visto que o modelo calcula a potência bruta indicada e esta apresenta valores muito próximos a potência efetiva experimental. Em termos de valores relativos, o modelo apresenta poucas discrepâncias à medida que o teor de água no combustível aumenta. Contudo, as disparidades são maiores quando um ensaio e outro são comparados. Na Tabela 29 são mostradas as diferenças relativas entre a potência experimental e simulada à medida que se troca o combustível no motor. É possível notar como o aumento da fração de água incide sobre o erro relativo entre a variação da potência experimental e a variação da mesma na simulação. Entretanto, é possível ver que o modelo calcula as variações de potência em função do teor de água com um erro relativo menor que 4,5%. SOUZA (2009, p. 99) considera que os resultados de um modelo de simulação termodinâmica de um motor com erro relativo abaixo de 8% podem ser considerados satisfatórios.

Na Tabela 30 são mostradas as diferenças relativas entre os valores de potência obtidos no ensaio com ponto fixo e com torque máximo. Novamente as diferenças entre os valores experimentais e simulados aumentam com a fração de água até um erro relativo de 12,46% no E60W40. Nas condições dos ensaios, a mistura E70W30 apresentou os maiores valores de potência experimental e simulada, sendo o maior valor obtido no ensaio MBT.

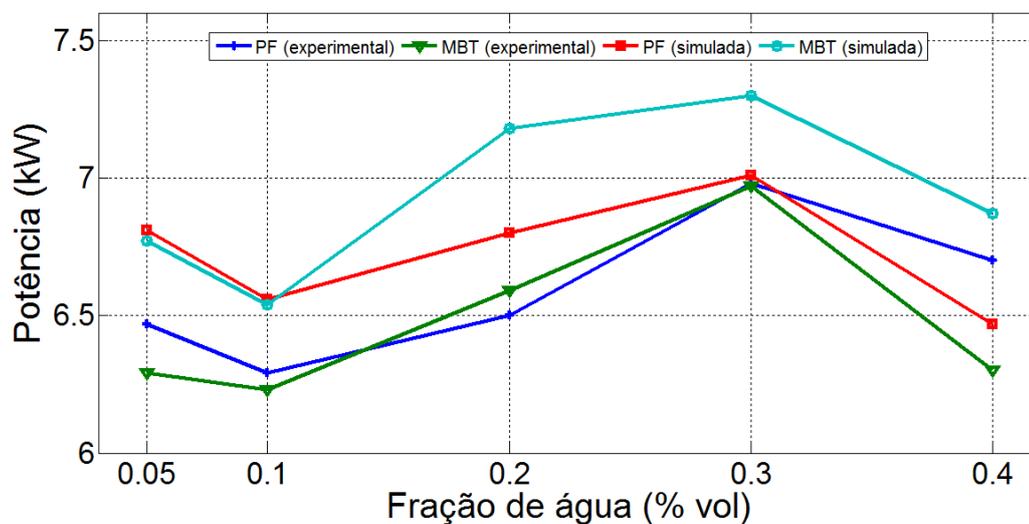


Figura 53 - Potência experimental e simulada em função da fração de água no combustível.

Tabela 29 - Variações relativas de potência para cada mudança no combustível.

Variação do combustível	PF			MBT		
	Potência (Exp.)	Potência (Simulada)	Erro relativo	Potência (Exp.)	Potência (Simulada)	Erro relativo
EHC - E90W10	-2,86%	-3,80%	0,94%	-0,96%	-3,52%	2,56%
E90W10 - E80W20	3,33%	3,65%	0,32%	5,78%	9,79%	4,01%
E80W20 - E70W30	7,38%	3,10%	4,28%	5,77%	1,77%	4,00%
E70W30 - E60W40	-4,18%	-8,34%	4,16%	-10,63%	-6,26%	4,37%

Tabela 30 - Variação relativa de potência entre os dois ensaios.

Ensaio PF - Ensaio MBT	Potência (Exp.)	Potência (Simulada)	Erro relativo
EHC	-2,80%	-0,60%	2,20%
E90W10	-0,96%	-0,30%	0,66%
E80W20	1,38%	5,55%	4,17%
E70W30	-0,14%	4,10%	4,24%
E60W40	-6,34%	6,12%	12,46%

5.5.2 Torque

Na Figura 54 é mostrado o torque de frenagem obtido experimentalmente em conjunto com o torque indicado obtido na simulação. O erro relativo nas simulações de variação do torque foi semelhante aos da variação de potência. O modelo calculou as variações de torque em função do combustível com um erro relativo de até 4,31% (Tabela 31). Por outro lado, o erro relativo da simulação do E60W40 novamente apresentou um valor elevado de 12,64% (Tabela 32). Para as condições experimentais utilizadas, a mistura E70W30 apresentou os maiores valores de torque de frenagem, sendo o mesmo resultado obtido para o torque indicado na simulação do ensaio com ponto fixo. Na simulação do ensaio MBT o torque máximo é atribuído ao E80W20, com um valor levemente superior ao do E70W30.

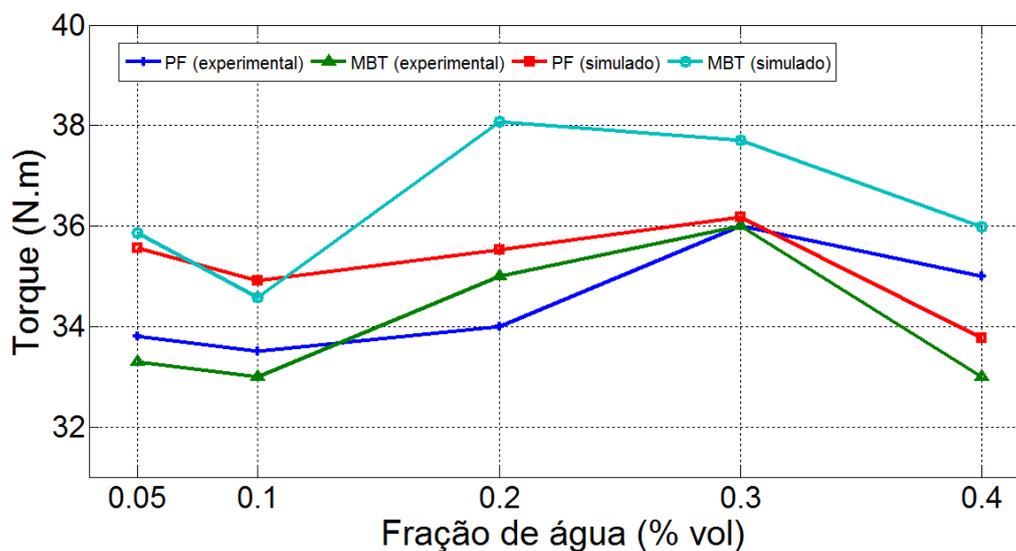


Figura 54 - Torque de frenagem e simulado em função da fração de água no combustível.

Tabela 31 - Variações percentuais do torque para cada mudança no combustível.

Variação do combustível	PF			MBT		
	Torque (Exp.)	Torque (Simulado)	Erro relativo	Torque (Exp.)	Torque (Simulado)	Erro relativo
EHC - E90W10	-0,90%	-1,86%	0,96%	-0,91%	-3,70%	2,79%
E90W10 - E80W20	1,49%	1,78%	0,29%	6,06%	10,12%	4,06%
E80W20 - E70W30	5,88%	1,83%	4,05%	2,86%	-0,98%	3,84%
E70W30 - E60W40	-2,86%	-7,17%	4,31%	-9,09%	-4,81%	4,28%

Tabela 32 - Variação relativa do torque entre os ensaios.

Ensaio PF - Ensaio MBT	Torque (Exp.)	Torque (Simulada)	Erro relativo
EHC	-1,50%	0,84%	2,34%
E90W10	-1,52%	-0,95%	0,57%
E80W20	2,94%	7,18%	4,24%
E70W30	0,00%	4,23%	4,23%
E60W40	-6,06%	6,58%	12,64%

5.5.3 Consumo específico de combustível

A Figura 55 mostra o consumo específico de combustível simulado e experimental para o etanol. Em ambos os ensaios o consumo tem um valor máximo para o E90W10 e decrescente até o E70W30, voltando a aumentar no E60W40, sendo que nas condições de MBT o consumo específico foi menor. Nas Tabelas 33 e 34 são mostradas as variações relativas entre a troca de combustíveis e entre os ensaios. Para a primeira, o maior erro relativo apresentado pelo modelo foi de 6,66%, enquanto entre os ensaios este erro foi de 13,09%. Também é possível observar no Quadro 16 como o consumo específico de combustível nas condições de MBT é reduzido em relação ao ponto fixo.

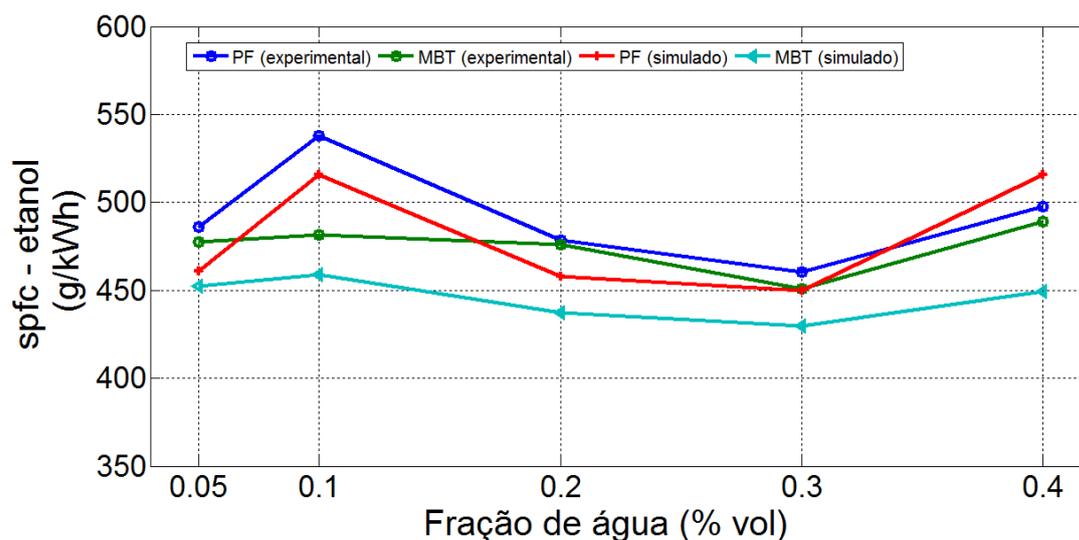


Figura 55 - Consumo específico de etanol experimental e simulado em função da fração de água no combustível.

Tabela 33 - Variações relativas do consumo específico de etanol para cada mudança no combustível.

Variação do combustível	PF			MBT		
	spfc (Exp.)	spfc (Simulado)	Erro relativo	spfc (Exp.)	spfc (Simulado)	Erro relativo
EHC - E90W10	10,58%	11,96%	1,38%	0,82%	1,51%	0,69%
E90W10 - E80W20	-12,35%	-12,64%	-0,29%	-1,18%	-5,05%	3,87%
E80W20 - E70W30	-3,92%	-1,83%	2,09%	-5,56%	-1,66%	3,90%
E70W30 - E60W40	8,06%	14,72%	6,66%	8,49%	4,49%	4,00%

Tabela 34 - Variação relativa do consumo específico de etanol entre os ensaios.

Ensaio PF - Ensaio MBT	spfc (Exp.)	spfc (Simulado)	Erro relativo
EHC	-1,85%	-1,86%	0,01%
E90W10	-11,70%	-12,35%	0,65%
E80W20	-0,59%	-4,58%	3,99%
E70W30	-2,17%	-4,60%	2,43%
E60W40	-1,76%	-14,85%	13,09%

A Figura 56 mostra o consumo específico de combustível simulado e experimental da mistura. É possível ver que este aumenta gradualmente à medida que mais água está presente no combustível. Nas Tabelas 35 e 36 são apresentados os desvios relativos da simulação em relação à variação de consumo experimental. Para a troca de combustíveis o erro relativo do modelo é de até 12,7% enquanto entre os ensaios este erro chega a 23,23%. Uma comparação com os erros obtidos no consumo específico de etanol fornece informação é um indicativo de que o modelo não calcula de forma precisa a massa de água presente no combustível. Conforme a fração de água aumenta na entrada das simulações o erro referente ao cálculo da massa se propaga, como é possível notar pelos crescentes valores da ITAE em função da hidratação do combustível. Também se observa que o consumo específico de mistura entre os ensaios varia de forma inversa ao consumo específico de etanol.

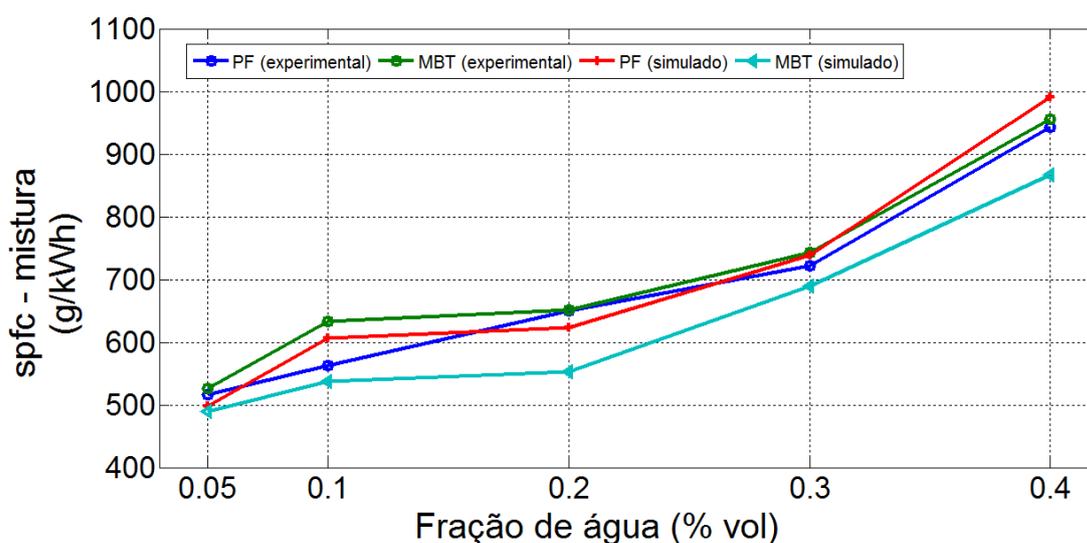


Figura 56 - Consumo específico experimental e simulado da mistura em função da fração de água no combustível.

Tabela 35 - Variações relativas do consumo específico da mistura para cada mudança no combustível.

Variação do combustível	PF			MBT		
	spfc (Exp.)	spfc (Simulado)	Erro relativo	spfc (Exp.)	spfc (Simulado)	Erro relativo
EHC - E90W10	9,09%	21,79%	12,70%	20,29%	9,84%	10,45%
E90W10 - E80W20	15,36%	2,64%	12,72%	2,90%	2,96%	0,06%
E80W20 - E70W30	11,10%	18,56%	7,46%	14,04%	24,50%	10,46%
E70W30 - E60W40	30,66%	34,24%	3,58%	28,82%	25,81%	3,01%

Tabela 36 - Variação relativa do consumo específico de mistura entre os ensaios.

Ensaio PF - Ensaio MBT	spfc (Exp.)	spfc (Simulado)	Erro relativo
EHC	1,85%	-1,86%	3,71%
E90W10	12,29%	-10,94%	23,23%
E80W20	0,16%	-12,59%	12,75%
E70W30	2,82%	-7,22%	10,04%
E60W40	1,37%	-14,40%	15,77%

5.5.4 Rendimento

A partir dos dados experimentais de consumo específico de combustível e dos dados da simulação, calculou-se a eficiência de conversão de combustível, ou rendimento, para cada mistura. O E70W30 apresentou a melhor eficiência em ambos os ensaios, enquanto o E90W10 e o E60W40 apresentaram os valores mais baixos, como pode ser visto na Figura 57. Para todos os combustíveis a eficiência na condição de MBT foi maior do que na de ponto fixo. Os erros relativos de previsão do modelo entre as trocas de combustível foram de até 6,61% e entre os ensaios de 12,91%, conforme mostrado nas Tabelas 37 e 38.

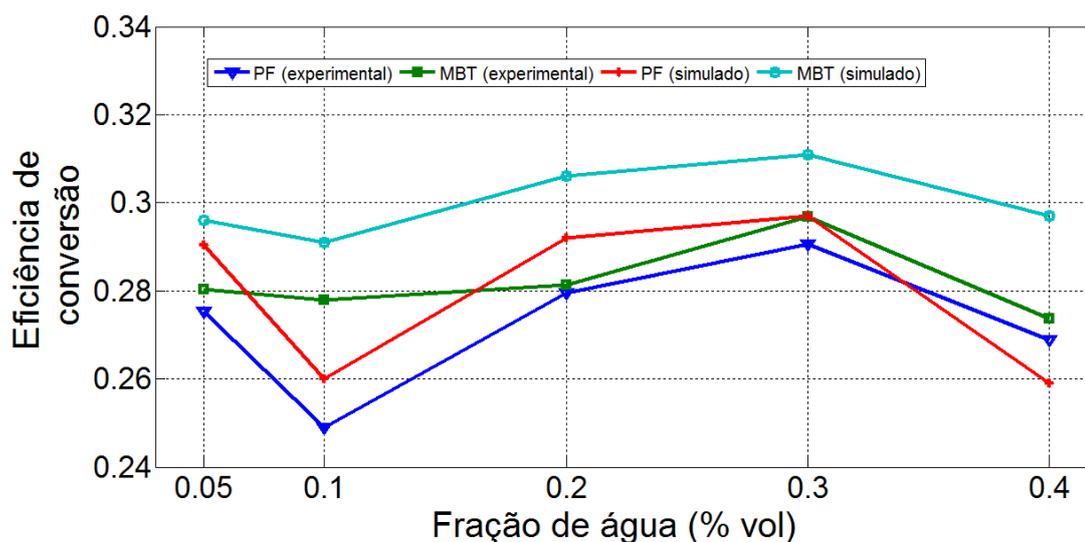


Figura 57 - Eficiência de conversão experimental e simulado da mistura em função da fração de água no combustível.

Tabela 37 - Variações relativas no rendimento para cada mudança no combustível.

Variação do combustível	PF			MBT		
	Rend. (Exp.)	Rend. (Simulado)	Erro relativo	Rend. (Exp.)	Rend. (Simulado)	Erro relativo
EHC - E90W10	-10,58%	-11,73%	1,15%	-0,82%	-1,72%	0,90%
E90W10 - E80W20	12,35%	12,31%	0,04%	1,18%	5,15%	3,97%
E80W20 - E70W30	3,92%	1,71%	2,21%	5,55%	1,63%	3,92%
E70W30 - E60W40	-8,06%	-14,67%	6,61%	-8,49%	-4,71%	3,78%

Tabela 38 - Variação relativa da eficiência de conversão entre os ensaios.

Ensaio PF - Ensaio MBT	Rend. (Exp.)	Rend. (Simulado)	Erro relativo
EHC	1,85%	1,89%	0,04%
E90W10	11,70%	11,92%	0,22%
E80W20	0,60%	4,79%	4,19%
E70W30	2,17%	4,71%	2,54%
E60W40	1,76%	14,67%	12,91%

5.5.5 Emissões

A Figura 58 mostra uma comparação entre as emissões nos diferentes ensaios. No ensaio PF, a fração volumétrica de CO_2 teve um valor máximo para a combustão da mistura E80W20, mas manteve-se aproximadamente constante na faixa entre 14,66% em volume e 15,2% em volume, valores próximos aos encontrados por Breaux *et al.* (2012), como mostra a Figura 18, na página 48. No ensaio MBT a concentração de CO_2 foi aproximadamente constante em uma faixa um pouco menor que no ensaio com ponto fixo.

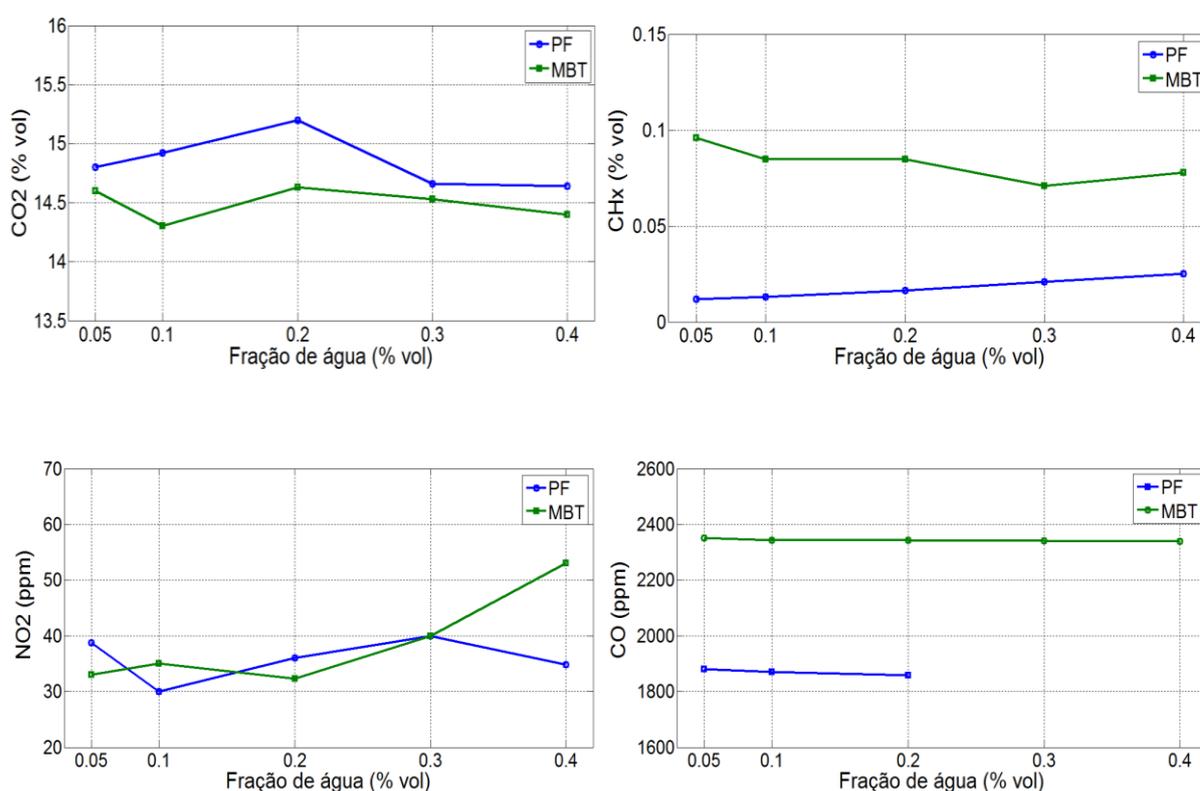


Figura 58 - Comparação entre as emissões nos ensaios com ponto fixo e com torque máximo.

No ensaio com ponto fixo, a concentração de CH_x aumentou com o teor de água no combustível, uma tendência semelhante a observada por Mack *et al.* (2009) e Gupta *et al.* (2010) (vide página 48). Por outro lado, no ensaio MBT a

concentração de CH_x diminuiu com o teor de água, embora tenha apresentado valores significativamente maiores que no ensaio com ponto fixo. A concentração de NO_2 no ensaio com ponto fixo apresentou um comportamento condizente com os valores de temperatura máxima no cilindro, tendo valores maiores para os combustíveis que geraram temperaturas mais elevadas. Entretanto, no ensaio MBT o comportamento foi praticamente o oposto, o que pode ter sido causado pelo adiantamento da reação de sua formação pelo avanço de ignição.

A concentração de CO no ensaio MBT foi aproximadamente 30% maior que no ensaio PF. Em conjunto com a variação de CO_2 entre os ensaios, isto pode ser indício de uma queima ineficiente nas condições de MBT. Contudo, é interessante ressaltar que há a possibilidade de ter ocorrido infiltrações de óleo lubrificante na câmara de combustão, uma vez que, como descrito no item 4.10.1, havia indícios de que o crescente teor de água alterava as propriedades do óleo, entre elas, suas características de escoamento, de forma que sua inclusão pode constituir uma fonte adicional de hidrocarbonetos na câmara de combustão.

5.5.6 Temperatura de exaustão

Na Figura 59 são comparadas as temperaturas de exaustão medidas no ensaio com ponto fixo e MBT. É possível notar que, de forma geral, a temperatura decai conforme a fração de água aumenta, concordando com o exposto por Breaux *et al.* (2012). As diferenças de temperatura entre os ensaios se ampliam até o E70W30, reduzindo-se no E60W40. O fato da condição de MBT exibir temperaturas de exaustão menores sugere que o calor dos gases é melhor aproveitado em seu ciclo, o que é corroborado pelos valores relativos de rendimento encontrados.

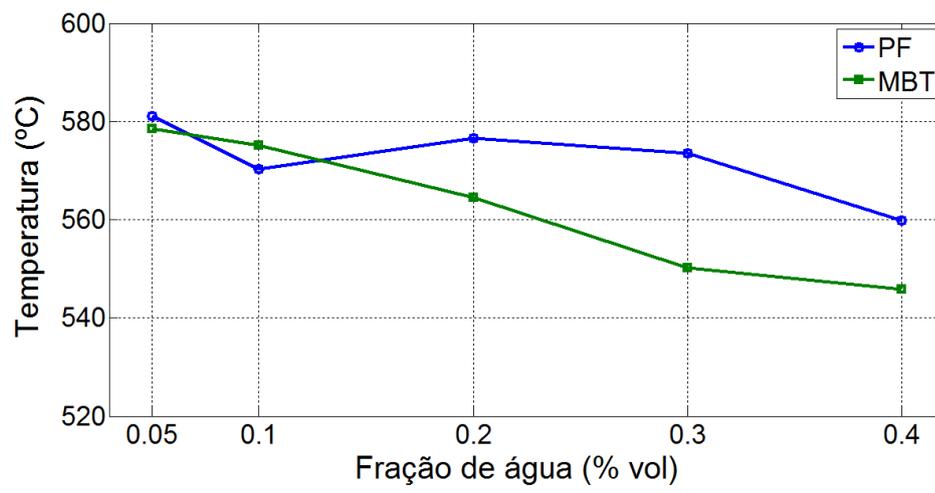


Figura 59 - Temperatura de exaustão dos gases.

6. CONCLUSÕES

Os ensaios realizados e os resultados obtidos comprovam que o motor é capaz de operar com misturas de etanol super-hidratado com até 40% em volume de água.

O modelo simulou satisfatoriamente os gradientes de pressão e temperatura no cilindro para uma fração de água de até 70% em volume, apresentando valores elevados de ITAE quando o teor de água era elevado para 40% em volume. As simulações das condições do ensaio MBT apresentaram uma correlação maior do que as condições do ensaio PF. Uma considerável parcela do erro é associada ao pressuposto que a mistura ar-combustível encontra-se totalmente vaporizada no início da compressão, subestimando a pressão nesta fase do ciclo e introduzindo erros nas condições iniciais na fase de combustão.

O modelo prevê as variações de potência, torque, consumo específico de etanol e eficiência térmica com um erro relativo menor que 7% em relação a variação da água no combustível e menor que 13% em relação a variação de condições dos ensaios. Entretanto, para o consumo específico da mistura, o modelo apresenta erros relativos maiores que 20% para diferentes condições de operação. A variação do erro entre o consumo específico de etanol e o consumo específico da mistura indica que o modelo necessita de ajustes no cálculo da massa do combustível no cilindro.

A concentração de CO_2 oscilou entre a faixa de 14,66% em volume (valor mínimo no ensaio com torque máximo) e 15,2% em volume (valor máximo no ensaio com ponto fixo). A maior concentração de CO e CH_x nos gases de exaustão durante o ensaio com torque máximo podem ser um indício de que pode ter ocorrido contaminação de água no óleo lubrificante com posterior infiltração na câmara de combustão. O NO_2 variou sua tendência em cada ensaio, indicando que o avanço de ignição pode ter um efeito significativo no seu comportamento, diminuindo com o teor de água no ensaio com ponto fixo e aumentando no ensaio MBT.

Em ambos os ensaios, o E70W30 apresentou os melhores valores de potência, torque, consumo específico e de rendimento e a menor temperatura dos gases de exaustão, sendo seguido pelo E80W20. O desempenho do EHC se situou

em valores intermediários enquanto o E60W40 e o E90W10 apresentaram os desempenhos mais baixos. Na comparação entre o ensaio com o ponto de ignição fixo e o ensaio com o torque máximo (MBT), este último apresentou os melhores desempenhos.

6.1 Sugestões para trabalhos futuros

Para uma avaliação mais completa do desempenho do motor torna-se interessante estruturar um modelo que englobe as fases de admissão e exaustão dos gases no cilindro, de forma que o trabalho de bombeamento do combustível seja quantificado, bem como o tempo de abertura e fechamento das válvulas e a eficiência volumétrica. A inclusão de submodelos que prevejam a transferência de calor por condução nas paredes do cilindro, no cabeçote e no pistão eliminaria a necessidade de simplificações, como foi feito em relação à temperatura da parede externa do cilindro.

Para avaliação dos efeitos da hidratação do etanol na combustão sugere-se o uso de modelos que estimem a transferência de massa entre fases, visto que na prática a mistura entre ar, etanol e água não se encontra totalmente vaporizada. Modelos deste tipo podem ser encontrados em TURNS (2000). Paralelamente, sugere-se o uso conjunto de modelos cinéticos para o cálculo da concentração de gases na exaustão.

Em termos dos efeitos da hidratação do combustível no desempenho do motor seria interessante realizar ensaios em condições operacionais diversas, como em rotações maiores que a faixa utilizada neste trabalho (1800 RPM), em cargas maiores e em intervalos maiores de λ . O efeito do pré-aquecimento do combustível hidratado também constitui uma base de estudo interessante.

REFERÊNCIAS

ABU-NADA, E., AL-HINTI, I., AKASH, B., AL-SARKHI, A.; **Thermodynamic analysis of spark-ignition engine using a gás mixture model for the working fluid**. International Journal of Energy Research, vol. 31, p. 1031-1046, Janeiro de 2007.

Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP). **Anuário Estatístico Brasileiro do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis 2011**. Gráfico 4.9, Vendas de etanol e gasolina automotiva no Brasil – 2001-2010.

Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP). **Resolução nº 7 de 09/02/2011**. Disponível em www.udop.com.br, 2011.

Associação Nacional dos Fabricantes de Veículos Automotores (ANFAVEA). **Anuário da Indústria Automobilística Brasileira - 2012**. Página 60, 2012.

BAILEY, B.K; **Handbook on Bioethanol: Production and Utilization**, Chapter 3: Performance of Ethanol as Transportation Fuel, 1996.

Balanco Energético Nacional 2011: Ano base 2010 / Empresa de Pesquisa Energética. – Rio de Janeiro : EPE, 2011.

BARROS, J.E.M.; **Estudo de motores de combustão interna aplicando análise orientada a objetos**. Tese de Doutorado, Engenharia Mecânica, UFMG. Belo Horizonte, 2003.

BEYERLEIN, S., MCLLROY, D., BLAKKETER, D., STECIAK J., CLARKE, E., MORTON, A.; **Homogeneous Charge Combustion of Aqueous Ethanol**. National Institute for Advanced Transportation Technology. Final report, February 2001.

BOUNDY, B. *et al.* **Biomass Energy Data Book: Edition 4**. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, 2011.

BREAUX, B., ACHARYA, S.; **The Effect of Elevated Water Content on Swirl-Stabilized Ethanol Air/Flames**. Fuel, vol. 105, p. 90-102, Outubro de 2012.

BREAUX, b., ACHARYA, S.; **The Effect of Elevated Water Content on Ethanol Combustion: a Feasibility Study**, Proceedings of the ASME 2011 Power Conference, Denver, Colorado 2011.

BREAUX, B.; **The Effect of Elevated Water Content on Ethanol Combustion**. Dissertação de Mestrado. Louisiana State university, Maio de 2009.

British Petroleum Statistical Review of World Energy June 2012. Disponível em www.bp.com/statisticalreview. Acessado em Setembro de 2012.

BUTTSWORTH, D.R.; **Spark Ignition Internal Combustion Engine Modelling Using Matlab**. Faculty of Engineering and Surveying Technical Reports, University of Southern Queensland, Report TR-2002-02, ISBN 1 877078 02 6, outubro de 2002.

CHALMERS, J., ARCHER, G., **Development of a sustainability reporting scheme for biofuels: A UK case study**. Energy Policy, vol.39, p. 5682–5689, 2011.

CHIODI, M.; **An Innovative 3D-CFD Approach towards Virtual Development of Internal Combustion Engines**. Vieweg und Teubner Verlag, 1st Ed., 2011.

CORDON, D., BEYERLEIN, S.; **Homogeneous Charge Catalytic Ignition of Ethanol-water/air mixtures in a Reciprocating Engine**. National Institute for Advanced Transportation Technology, University of Idaho, abril de 2009.

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

COUPER, J.R., PENNEY, W.R., FAIR, J.R., WALAS, S.M.; **Chemical Process Equipment: Selection and Design**, 2nd Ed. Elsevier, 2005.

CURTO-RISSO, P.L., MEDINA, A., HERNÁNDEZ, A.C.; **Optimizing the geometrical parameters of a spark ignition engine: Simulation and theoretical tools**. Applied thermal engineering, vol.31, n.5, p. 803-810, Abril de 2011.

D'ERRICO, G., CERRI, T., PERTUSI, G.; **Multi-objective optimization of internal combustion engines by means of 1D-fluid-dynamic models**. Applied Energy, vol.88, n.3, p. 767-777, Março de 2011.

DORMAND, J. R., PRINCE, P. J.; **A Family of Embedded Runge-Kutta Formulae**, Journal of Computational and Applied Mathematics, Volume 6, 1980, p. 19-26.

EEA; **Source of Air Pollution**, 2008, disponível em www.eea.europa.eu. Acessado em 04/10/2012.

EGOLFOPOULOS, F.N., DU, D.X., LAW, C.K.; **A study on ethanol oxidation kinetics in laminar premixed flames, flow reactors and shock tubes**. 24th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, p. 833-841, 1992.

FERGUSON, C.R.; **Internal Combustion Engines, applied thermosciences**. John Wiley & Sons, 1986.

FREITAS, L.C., KANEKO, S.; **Ethanol Demand in Brazil: Regional Approach**. Energy Policy, volume 39, p. 2289-2298, 2011.

GORDON, S., McBRIDE, B. J.; **Computer Program** for the Calculation of Complex Chemical Equilibrium Composition, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks, and Chapman-Jouguet Detonations. NASA publication SP-273, 1971.

GUPTA, P., SAE-WANG, V., KANBUA, P., LAOONUAL, Y.; **Impact of Water Contents Blended with Ethanol on SI Performance and Emissions**. The First International Conference on Mechanical Engineering. 20-22 Outubro de 2010.

HEYWOOD, J. B.; **Internal Combustion Engine Fundamentals**. McGraw-Hill series in Mechanical Engineering, 1988.

HIRA, A., OLIVEIRA, L.G.; **No substitute for oil? How Brazil developed its ethanol industry**. Energy Policy, 2009.

HOCHGREB, S.; **Handbook of Air pollution from Internal Combustion Engines, Pollutant Formation and Control. Capítulo 6: Combustion-Related Emissions in SI Engines**. Academic Press, 1998.

JANAF Thermochemical Tables, 2d Ed., NSRDS-NB537, **U.S. National Bureau of Standards**, Junho de 1971.

KANEKO, S., FREITAS, L.C.; **Ethanol demand under the flex-fuel technology regime in Brazil**. Energy Economics, 2011.

KLASS, D.L.; **Biomass for Renewable Energy, Fuels and Chemical** – Chapter 11: Synthetic Oxygenated Liquid Fuels, páginas 383-443, 1998.

LADISCH, M. R., DYCK, K.; **Dehydration of Ethanol: New Approach Gives Positive Energy Balance**, Science, Volume 205, No. 4409, pp. 898-900, 1979.

LADISCH, M.R., DYCK, K.; **Dehydration of Ethanol: New Approach Gives Positive Energy Balance**. Science, 1979.

LI, J., KAZAKOV, A., CHAOS, M., DRYER, F.L.; **Chemical Kinetics of Ethanol Oxidation**. 5th U.S. Combustion Meeting, paper C26, Março de 2007.

LOUNICI, M.S., LOUBAR, K., BALISTROU, M., TAZEROUT, M.; **Investigation on Heat Transfer Evaluation for a More Efficient Two-zone Combustion Model in the Case of Natural Gas SI Engines**. Applied Thermal Engineering, volume 31, 2010.

MACEDO, I.C., SEABRA, J.E.A., SILVA, J.E.R; **Green house gases emissions in the production and use of ethanol from sugarcane: The 2005/2006 averages and a prediction for 2020**. Biomass & Bioenergy, 2008.

MACK, J.H., ACEVES, S.M., DIBBLE, R.W.; **Demonstrating Direct Use of Wet Ethanol in a Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Engine**. Energy, Vol. 34, Pages 782-787, Junho de 2009.

MARINOV, N.M.; **A detailed chemical kinetic model for high temperature ethanol oxidation**. U.S. Department of Energy / Lawrence Livermore National Laboratory, W-7405-ENG-48, 1998.

MARTINEZ-FRIAS, J., ACEVES, S.M., FLOWERS, D.L.; **Improving Ethanol Life Cycle Energy Efficiency by Direct Utilization of Wet Ethanol in HCCI Engines**. Lawrence Livermore National Laboratory, 2007.

MATHWORKS; **1-D Data Interpolation (interp1)**. Disponível em www.mathworks.com. Acessado em Janeiro de 2013.

McCALLISTER, S., CHEN, J. Y., FERNANDEZ-PELLO, A. C.; **Fundamentals of Combustion Process**. Springer Science and Business Media, 2011.

MELO, T.C., MACHADO, G.B., BELCHIOR, C.R.P., COLAÇO, M.J., BARROS, J.E.M., OLIVEIRA, E.J., OLIVEIRA, D.G.; **Hydrous ethanol–gasoline blends – Combustion and emissions investigations on a Flex-Fuel engine**. Fuel, Volume 97, Pages 796-804, July 2012.

MENDERA, K. Z.; **Burn rates profiles for Compression Ignition engine model**. Journal of KONES Internal Combustion Engines, vol. 12, 1-2. Czstochowa University of Technology, Institute of Internal Combustion Engines and Control Engineering, 2005.

MILTON, B.E.; **Handbook of Air pollution from Internal Combustion Engines, Pollutant Formation and Control. Capítulo 8: Control Technologies in Spark-Ignition Engines**. Academic Press, 1998.

Ministério do Meio Ambiente; **1º Inventário Nacional de Emissões Atmosféricas por Veículos Automotores Rodoviários**. Janeiro de 2011.

MUNSIN, R., LAOONUAL, Y., JUGJAI, S., IMAI, Y.; **An Experimental Study on Performance and Emissions of a Small SI Engine Generator Set Fuelled by Hydrous Ethanol with High Water Contents up to 40%**. Fuel, disponível online em Janeiro de 2013.

NORTON, T.S., DRYER, F.L.; **An Experimental and modeling study of ethanol oxidation kinetics in a atmospheric pressure flow reactor**. International Journal of Chemical Kinetics, vol.24, p. 319-343, 1992.

Organisation Internationale des Constructeurs d'Automobiles (OICA); **World Motor Vehicle Production by Country and Type**, 2012, disponível em www.oica.net/wp-content/uploads/cars-2012.pdf. Acessado em 03/10/2012.

PARIOTIS, E.G., KOSMADAKIS, G.M., RAKOPOULOS, C.D.; **Comparative analysis of three simulation models applied on a motored internal combustion engine**. Energy Conversion and Management, vol.60, p. 45-55, 2012.

PERRY, R. H., GREEN D. W., MALONEY, J. O.; **Perry's Chemical Engineers Handbook**, 7ª edição, McGraw-Hill, 1997.

PULKRABEK, W.W.; **Engineering Fundamental of the Internal Combustion Engine**. Prentice Hall, Abril de 1997.

RAJAN, S., SANIEE, F.F.; **Water-ethanol-gasoline blends as spark ignition engine fuels**. Carbondale, IL 62901, 1982.

RAKOPOULOS, C.D., GIAKOUMIS, E.G.; **Second-law analyses applied to internal combustion engines operation**. Progress in Energy and Combustion Science, vol.32, n.1, p. 2-47, 2006.

RAVINDRANATH, N. H. *et al.*, **Biofuel production and implications for land use, food production and environment in India**. Energy Policy, vol. 39, p. 5737-5745, 2011.

ROBERTSON, G. H., PAVLATH, A. E., **Dehydration of Ethanol**. U. S. Patent. number 4,556,460, december, 03, 1985.

RÖHL, O., PETERS, N.; **A Reduced Mechanism for Ethanol Oxidation**. Proceedings of the European Combustion Meeting, 2009.

SALES, L.C.M., SODRÉ, J.R.; **Cold Start Characteristics of na Ethanol-Fuelled Engine With Heated Intake Air and Fuel**. Applied Thermal Engineering, volume 40, p. 198-201, Julho de 2012.

SALLA, D.A., FURLANETO, F.B.P., CABELLO, C., KANTHACK, R.A.D.; **Análise energética de sistemas de produção de etanol de mandioca (*Manihot esculenta* Crantz)**. Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental. Volume 14, página 444-448, 2010.

SANTOS, D.; **Modelo termodinâmico para a simulação do ciclo de operação de motores de ignição por centelha**. Dissertação de Mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Paraná. Curitiba, 2009.

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, vol. 98, p. 448-457, October 2012.

SEKMEN, P., SEKMEN, Y.; **Mathematical modeling of a SI engine cycle with actual air-fuel cycle analysis**. Mathematical and Computational Applications, vol.12, n.3, p. 161-171, 2007.

SORDA, G. *et al.*, **An overview of biofuel policies across the world**. Energy Policy, n 38, p. 6977–6988, 2010.

STECIAK, J., BEYERLEIN, S., JONES, H., KLEIN, M., KRAMER, S., WANG, X.; **Catalitic Reactor Studies**. National Institute for Advanced Transportation Technology. Final report, September 2001.

TANNER, R.L., MIGUEL, A.H., ANDRADE, J.B., GAFFNEY, J.S., STREIT, G.E.; **Atmospheric Chemistry of Aldehydes: Enhanced Peroxyacetyl Nitrate Formation from Ethanol-Fueled Vehicular Emissions**. Environmental Science and Technology, volume 22, p. 1026-1034, 1988.

URNS, S.R.; **An Introduction to Combustion: Concepts and Applications**. McGraw-Hill, 2000.

United States Environmental Protection Agency (EPA). **Hazard Summary – Acetaldehyde (2007)**. Disponível em <http://www.epa.gov/ttn/atw/hlthef/acetalde.html>. Acessado em Setembro de 2012.

WALAS, S. M.; **Chemical Process Equipment: Selection and Design**, Butterworth-Heinemann, 1990.

WANG, X., STECIAK, J., BEYERLEIN, S.; **Impact of water on stable species formation during ethanol-air combustion in plug flow**. Western States Section / Combustion Institute Spring Meeting, Março de 2004.

ZVIRIN, Y., GUTMAN, M., TARTAKOVSKY, L.; **Handbook of Air Pollution from Internal Combustion Engines**, Chapter 16: Fuel Effect on Emissions, páginas 547-651, 1998.

Apêndice A – Coeficientes de GORDON & McBRIDE (1971) para propriedades termodinâmicas dos gases - Equações (6.1) até (6.3).

Espécie (i)	Faixa de T (K)	<i>ai1</i>	<i>ai2</i>	<i>ai3</i>	<i>ai4</i>	<i>ai5</i>	<i>ai6</i>	<i>ai7</i>
CO2	1000-5000	0,44608041(+1)	0,30981719(-2)	-0,12392571(-5)	0,22741325(-9)	-0,15525954(-13)	-0,48961442E(+5)	-0,98635982
	300-1000	0,24007797(+1)	0,87350957(-2)	-0,66070878(-5)	0,20021861(-8)	0,63274039(-15)	-0,48377527(+5)	0,96951457(+1)
H2O	1000-5000	0,27167633(+1)	0,29451374(-2)	-0,80224374(-6)	0,10226682(-9)	-0,48472145(-14)	-0,29905826(+5)	0,66305671(+1)
	300-1000	0,40701275(+1)	-0,11084499(-2)	0,41521180(-5)	-0,29637404(-8)	0,80702103(-12)	-0,30279722(+5)	-0,32270046
N2	1000-5000	0,28963194(+1)	0,15154866(-2)	-0,57235277(-6)	0,99807393(-10)	-0,65223555(-14)	-0,90586184(+3)	0,61615148(+1)
	300-1000	0,36748261(+1)	-0,12081500(-2)	0,23240102(-5)	-0,63217559(-9)	-0,22577253(-12)	-0,10611588(+4)	0,23580424(+1)
O2	1000-5000	0,36219535(+1)	0,73618264(-3)	-0,19652228(-6)	0,36201558(-10)	-0,28945627(-14)	-0,12019825(+4)	0,36150960(+1)
	300-1000	0,36255985(+1)	-0,18782184(-2)	0,70554544(-5)	-0,67635137(-8)	0,21555993(-11)	-0,10475226(+4)	0,43052778(+1)
CO	1000-5000	0,29840696(+1)	0,14891390(-2)	-0,57899684(-6)	0,10364577(-9)	-0,69353550(-14)	-0,14245228(+5)	0,63479156(+1)
	300-1000	0,37100928(+1)	-0,16190964(-2)	0,36923594(-5)	-0,20319674(-8)	0,23953344(-12)	-0,14356310(+5)	0,29555350(+1)
H2	1000-5000	0,31001901(+1)	0,51119464(-3)	0,52644210(-7)	-0,34909973(-10)	0,36945345(-14)	-0,87738042(+3)	-0,19629421(+1)
	300-1000	0,30574451(+1)	0,26765200(-2)	-0,58099162(-5)	0,55210391(-8)	-0,18122739(-11)	-0,98890474(+3)	-0,22997056(+1)
H	1000-5000	0,25(+1)	0	0	0	0	0,25471627(+5)	-0,46011763
	300-1000	0,25(+1)	0	0	0	0	0,25471627(+5)	-0,46011762
O	1000-5000	0,25420596(+1)	-0,27550619(-4)	-0,31028033(-8)	0,45510674(-11)	-0,43680515(-15)	0,29230803(+5)	0,49203080(+1)
	300-1000	0,29464287(+1)	-0,16381665(-2)	0,24210316(-5)	-0,16028432(-8)	0,38906964(-12)	0,29147644(+5)	0,29639949(+1)
OH	1000-5000	0,38375943(+1)	0,95931650(-3)	-0,19441702(-6)	0,13756646(-10)	0,14224542(-15)	0,39353815(+4)	0,54423445(+1)
	300-1000	0,38375943(+1)	-0,10778858(-2)	0,96830378(-6)	0,18713972(-9)	-0,22571094(-12)	0,36412823(+4)	0,49370009
NO	1000-5000	0,31890000(+1)	0,13382281(-2)	-0,52899318(-6)	0,95919332(-10)	-0,64847932(-14)	0,98283290(+4)	0,67458126(+1)
	300-1000	0,40459521(+1)	-0,34181783(-2)	0,79819190(-5)	-0,61139316(-8)	0,15919076(-11)	0,97453934(+4)	0,29974988(+1)

Apêndice B – Coeficientes de HEYWOOD (1988) para propriedades termodinâmicas do etanol – Equações (7.1) até (7.3).

Espécie	<i>a1,f</i>	<i>a2,f</i>	<i>a3,f</i>	<i>a4,f</i>	<i>a5,f</i>	<i>a6,f</i>	<i>a7,f</i>
C ₂ H ₅ OH	6,99	39,741	-11,926	0	0	-60,214	7,6135

Apêndice C – Coeficientes da equação de determinação das constantes de equilíbrio - Equação (67). Fonte: FERGUSON (1986).

	A₁	A₂	A₃	A₄	A₅
K1	0,432168	-0,112464(+5)	0,267269(+1)	-0,745744(-4)	0,242484(-8)
K2	0,310805	-0,129540(+5)	0,321779(+1)	-0,738336(-4)	0,344645(-8)
K3	-0,141784	-0,213308(+4)	0,853461	0,355015(-4)	-0,310227(-8)
K4	0,150879(-1)	-0,470959(+4)	0,646096	0,272805(-5)	-0,154444(-8)
K5	-0,752364	0,124210(+5)	-0,260286(+1)	0,259556(-3)	-0,162687(-7)
K6	-0,415302(-2)	0,148627(+5)	-0,475746(+1)	0,124699(-3)	-0,900227(-8)

Anexo A – Correlações utilizadas para cálculo da concentração de CO₂ na rotina interna do CMS-7. Fonte: MADUR (2007).

1) Cálculo da concentração teórica máxima de CO₂ na combustão (calculada pelo usuário ao inserir o banco de dados do combustível):

Admitindo uma reação de combustão estequiométrica na qual todo o combustível e o oxigênio são convertidos em produtos, tem-se que:

$$CO_2 \text{ max} = \frac{\text{mols de } CO_2}{\text{mols de produtos}} \times 100\% \quad (83)$$

Sendo a seguinte relação válida:

$$CO_2 \text{ max} = \frac{c}{c + \left[\frac{79,1}{20,9} \times \left(c + \frac{h}{4} \right) \right]} \times 100\% \quad (84)$$

Onde c e h é o número de átomos de carbono e hidrogênio na molécula de combustível, respectivamente. Para o etanol, temos que:

$$CO_2 \text{ max} = \frac{2}{2 + \left[\frac{79,1}{20,9} \times \left(c + \frac{6}{4} \right) \right]} \times 100\% = 13,11\% \quad (85)$$

2) Cálculo da concentração de CO₂ nos gases (% volume):

$$CO_2 = \frac{CO_2 \text{ max}}{FEA} \quad (86)$$

Onde FEA é o fator de excesso de ar, calculado a partir da concentração de oxigênio medida no analisador.