

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA  
CENTRO DE TECNOLOGIA  
CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

**Filipe Augusto Herzer**

**PREDIÇÃO DE DIAGRAMAS DE PRESSÃO E TAXA DE  
LIBERAÇÃO DE CALOR DE MODELOS DE CINÉTICA QUÍMICA  
APLICADOS A SIMULAÇÃO DE COMBUSTÃO HCCI**

Santa Maria, RS

2023

**Filipe Augusto Herzer**

**PREDIÇÃO DE DIAGRAMAS DE PRESSÃO E TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR DE MODELOS DE CINÉTICA QUÍMICA APLICADOS A SIMULAÇÃO DE COMBUSTÃO HCCI**

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Curso de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS) como requisito parcial para obtenção do título de **Engenheiro Mecânico**.

**Filipe Augusto Herzer**

Orientador: Prof. Thompson Diórdinis Metzka Lanzasova, PhD

Santa Maria, RS  
2023

**PREDIÇÃO DE DIAGRAMAS DE PRESSÃO E TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR DE MODELOS DE CINÉTICA QUÍMICA APLICADOS A SIMULAÇÃO DE COMBUSTÃO HCCI**

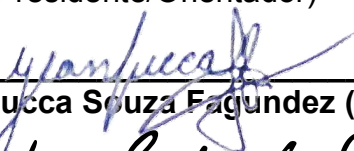
Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Curso de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS) como requisito parcial para obtenção do título de **Engenheiro Mecânico**.

**Aprovado em 16 de junho de 2023:**



---

**Thompson Diórdinis Metzka Lanzasova, PhD. (UFSM)**  
(Presidente/Orientador)



---

**Dr. Jean Lucca Souza Fagundes (UFSM)**



---

**Dr. Leandro Costa De Oliveira (UFSM)**

Santa Maria, RS

2023

## **AGRADECIMENTOS**

Aos meus pais e irmão, pelo amor incondicional e incentivo financeiro durante o período de graduação.

Ao meu orientador Thompson Diórdinis Metzka Lanzasova pelo suporte em projetos de pesquisa anteriores e por aceitar conduzir o presente trabalho.

A todos os meus professores do curso de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Maria pela excelência técnica e por capacitar profissionais quanto à sua formação, dedicação e capacidade crítica e analítica. Estendo o agradecimento a toda Coordenação do curso de Engenharia Mecânica, professores de outros cursos e Secretariado, em especial a Jupira da Costa Rodrigues.

Aos professores Mario Eduardo Santos Martins, Macklini Dalla Nora e Nina Paula Gonçalves Salau pela dedicação junto aos grupos Grupo de Pesquisa em Motores, Combustíveis e Emissões (GPMOT-UFSM) e Laboratório de Engenharia de Processos Assistida por Computador (LEPAC-UFSM). Pela possibilidade de aprender e participar desses, pelo auxílio em trabalhos, artigos e bolsas de Iniciação Científica.

A Guilherme Yago Zulian, Igor Rodrigues dos Santos, Juliano Pereira Silveira, Geovane Alberto Frizzo Prante, Sergio Stefanello e Lincoln Prado, que possibilitaram o presente trabalho, pelo apoio fornecido nos testes experimentais, dúvidas e conselhos.

Aos amigos de Montenegro, do GPMOT, de diversos cursos de engenharia do Centro de Tecnologia e do Diretório Acadêmico, pelo amor, cotidiano e pela parceria.

## RESUMO

### PREDIÇÃO DE DIAGRAMAS DE PRESSÃO E AHRR DE MODELOS DE CINÉTICA QUÍMICA APLICADOS A SIMULAÇÃO DE COMBUSTÃO HCCI

AUTOR: Filipe Augusto Herzer

ORIENTADOR: Thompson Diordinis Metzka Lanza Nova

A cinética química é o estudo quantitativo da reação química que é influenciada por diversos parâmetros como, por exemplo, temperaturas, pressões de admissão e exaustão e combustível utilizado. Esse método de análise de combustão é mais preciso quando comparado a métodos de reações globais pois considera reações intermediárias, e não somente a quantidade de reagente e produtos. Os mecanismos de cinética química diferem entre si pela quantidade distinta de reações e elementos a serem considerados, que são incorporadas à simulação de acordo com o modelo e o seu corpo de texto em um formato pré-definido, como ChemKin ou Cantera. Deseja-se, portanto, averiguar a predição dos diagramas de pressão na área próxima a combustão (320° a 420° CAD) e taxa de liberação de calor aparente (*apparent heat release rate* – AHRR) de dois diferentes modelos de cinética química quando aplicados a um modelo de simulação de motores desenvolvido no software GT-Power. Os dados advindos da simulação são comparados a dados experimentais através do coeficiente de determinação ( $R^2$ ) e erro relativo normalizado e absoluto, caracterizando melhores faixas de operação para os modelos de cinética química quanto a temperatura de admissão, fração de EGR e hidratação do etanol utilizado como combustível.

**Palavras-chave:** Cinética química, Combustão, HCCI, Simulação.

## ABSTRACT

### PREDICTION OF PRESSURE AND HEAT RELEASE RATE DIAGRAMS OF CHEMICAL KINETICS MODELS APPLIED TO HCCI COMBUSTION SIMULATION

AUTHOR: Filipe Augusto Herzer

ADVISOR: Thompson Diordinis Metzka Lanzasova

Chemical kinetics is the quantitative study of the chemical reaction that is influenced by several parameters, such as, for example, temperatures, intake and exhaust pressures and fuel used. This combustion analysis method is more accurate when compared to global reaction methods because it considers intermediate reactions, not just the number of reactants and products. The chemical kinetics mechanisms differ from each other by the different number of reactions and elements to be considered, which are incorporated into the simulation according to the model and its body of text in a specific format, like ChemKin or Cantera. Therefore, it is desired to verify the prediction of the pressure diagrams in the area close to the combustion (320° to 420° CAD) and the apparent heat release rate (AHRR) of two different models of chemical kinetics when applied to an engine simulation model developed in the GT-Power software. The data from the simulation are compared to experimental ones through the coefficient of determination ( $R^2$ ) and normalized and absolute relative error, characterizing and pointing better operating ranges for the chemical kinetics models regarding inlet temperature, EGR fraction and hydration of the ethanol used as fuel.

**Keywords:** Chemical Kinetics, Combustion, HCCI, Simulation.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Diferenças entre os modos de combustão SI, CI e HCCI .....	13
Figura 2: Gráfico de energia da reação ao decorrer da reação .....	18
Figura 3: Esquema do motor com suas modificações .....	23
Figura 4: Modelo unidimensional da configuração do motor utilizado .....	28
Figura 5: Diagramas de pressões: Teste basal – Caso 1. ....	33
Figura 6: Diagramas de AHRR: Teste basal – Caso 1. ....	34
Figura 7: Diagramas de pressões: Teste basal – Caso 2 .....	35
Figura 8: Diagramas de AHRR: Teste basal – Caso 2. ....	37
Figura 9: Diagramas de pressões: Alto EGR – Caso 3.....	38
Figura 10: Diagramas de AHRR: Alto EGR – Caso 3. ....	39
Figura 11: Diagramas de pressão: Alto EGR – Caso 4 .....	40
Figura 12: Diagrama de AHRR: Alto EGR – Caso 4.....	41
Figura 13: Diagrama de pressões: Diferentes combustíveis – Caso 5. ....	42
Figura 14: Diagrama de AHRR: Diferentes combustíveis – Caso 5.....	43
Figura 15: Diagrama de pressões: Diferentes combustíveis – Caso 6. ....	44
Figura 16: Diagrama de AHRR: Diferentes combustíveis – Caso 6.....	45

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Características de composição dos modelos de cinética química. . .	19
Tabela 2: Parâmetros do motor.....	24
Tabela 3. Pontos de operação e parâmetros de controle.....	27
Tabela 4. Configurações computacionais utilizadas.....	28
Tabela 5. Pontos de operação e coeficiente de determinação e erro relativo normalizado.. ..	46
Tabela 6. Custo computacional médio para cada Caso com mecanismo cinético.....	48



## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

EGR	Recirculação dos gases da exaustão, do inglês <i>Exhaust Gas Recirculation</i>
PFI	Injeção de combustível na porta, do inglês <i>Port Fuel Injection</i>
CAD	Ângulo de virabrequim, do inglês <i>Crank Angle Degree</i>
AHRR	Taxa de liberação de calor aparente, do inglês <i>Apparent Heat Release Rate</i>
$\lambda$	Fator de excesso de ar (Lambda)
HCCI	Ignição por Compressão de carga homogênea, do inglês <i>Homogeneous Charge Compression Ignition</i>
NOx	Óxido de Nitrogênio
SI	Ignição por centelha, do inglês <i>Spark Ignition</i>
CI	Ignição por compressão, do inglês <i>Compression Ignition</i>
R	Coeficiente de correlação
R <sup>2</sup>	Coeficiente de determinação
TPS	Sensor de posição do corpo de borboleta, do inglês <i>Throttle Position Sensor</i>
E93W07	93% v/v etanol e 7% v/v de água
E80W20	80% v/v etanol e 20% v/v de água
IMEP	Pressão efetiva média indicada, do inglês <i>indicated mean effective pressure</i>

## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO</b> .....	<b>10</b>
1.1 OBJETIVOS DO TRABALHO.....	11
1.1.1 Objetivo Geral .....	11
1.1.2 Objetivos Específicos .....	11
<b>2 DESENVOLVIMENTO</b> .....	<b>12</b>
2.1 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	12
2.1.1 Combustão HCCI .....	12
2.1.2 Cinética química.....	15
2.1.2.1. Reações globais.....	16
2.1.2.2. Reações Elementares .....	17
2.1.3 Mecanismos de cinética química.....	18
2.1.4 Simulação computacional em motores de combustão interna .....	19
2.2 MATERIAIS E METODOLOGIA.....	22
2.2.1 Adaptação de um motor Diesel para etanol de HCCI .....	22
2.2.2 Instrumentação para aquisição de dados .....	24
2.2.3 Procedimento de testes de motor em bancada .....	25
2.2.4 Modelagem numérica do modelo de simulação .....	27
2.2.5 Métodos de análise de diagramas de pressão e AHRR .....	30
<b>3 RESULTADOS E DISCUSSÕES</b> .....	<b>32</b>
3.1 ANÁLISE DE DIAGRAMAS DE PRESSÃO E AHRR .....	32
3.1.1 Pontos operacionais de alta carga .....	32
3.1.2 Pontos operacionais de alta fração de EGR.....	36
3.1.3 Pontos operacionais com etanol e diferentes graus de hidratação .....	40
3.2 COMPARAÇÃO NUMÉRICA DAS SIMULAÇÕES .....	44
3.3 CUSTO COMPUTACIONAL.....	46
<b>4 CONCLUSÃO</b> .....	<b>47</b>
<b>5 CONSIDERAÇÕES FINAIS</b> .....	<b>51</b>
5.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	51

## 1 INTRODUÇÃO

O interesse mundial por combustíveis renováveis e novas tecnologias de combustão crescem a cada dia e é impulsionado pelos recursos energéticos limitados e desafios do uso de combustíveis fósseis, tais como poluição ambiental e níveis crescentes de gases de aquecimento global na atmosfera. Uma das fontes destes são os motores de combustão interna, uma vez que a queima de combustíveis fósseis pode ter contribuído com o aumento de 70% nos gases de efeito estufa nas últimas quatro décadas (BENDU, 2014). Além das emissões do setor de transportes, um importante impacto ambiental é causado pelos motores geradores de energia, que geralmente funcionam sob condições de operação de ignição por compressão com Diesel.

Como uma alternativa de modo de combustão, a ignição por compressão de carga homogênea (HCCI), apesar de não ser um conceito novo, revela-se viável para motores de combustão interna, já que esse modo de combustão é capaz de ser uma alternativa menos poluente quanto a emissões, aplicável, por exemplo, nas unidades geradoras com menores variações quanto a rotação. A combustão HCCI combina características de motores de ignição por centelha e ignição por compressão, e atualmente atrai interesse pela alta eficiência e baixa emissão de NO<sub>x</sub> e material particulado.

Uma medida que beneficia a pesquisa de motores em termos de redução de custos e tempo de desenvolvimento é a substituição de longos períodos de testes experimentais por procedimentos de simulação computacional nas possíveis ocasiões. Este processo promove o desenvolvimento de novas tecnologias computacionais, como novos softwares ou códigos a serem aplicados em programas existentes. Como a combustão HCCI apresenta maiores dificuldades de controle quando comparada a outros tipos de combustão, é possível utilizar a simulação para auxiliar no entendimento deste processo.

Os modelos de cinética química analisados foram o detalhado NUI Galway e uma versão reduzida do mesmo mecanismo, denominada Skeleton, visando a redução de custo computacional.

## 1.1 OBJETIVOS DO TRABALHO

### 1.1.1 Objetivo Geral

Avaliar a validade de modelos de cinética química NUI Galway detalhado e uma versão reduzida do mesmo mecanismo para predição da taxa de liberação de calor e diagrama de pressão de combustão. Esses mecanismos serão aplicados à um modelo de motor desenvolvido em software computacional de simulação, considerando diversos pontos de operação utilizando combustão HCCI de etanol (E100, E93W07 e E80W20).

### 1.1.2 Objetivos Específicos

- Adquirir dados de relação ar-combustível (fator  $\lambda$ ), temperatura, pressão, emissões e consumo para todos os pontos experimentais com intuito de validar o modelo de simulação. Também busca-se adquirir dados de pressão de ciclos *motored* (ou seja, sem combustão e movido por outros cilindros), de forma que viabilize melhores controles quanto aos coeficientes de descarga e distribuição de vazão entre os cilindros.
- Realizar comparações acerca dos valores de pressão no cilindro entre os resultados simulados e os resultados experimentais.
- Discorrer acerca do custo computacional para o processamento de cada mecanismo cinético, levando em conta o resultado de aproximação de curvas obtido.

## 2 DESENVOLVIMENTO

### 2.1 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

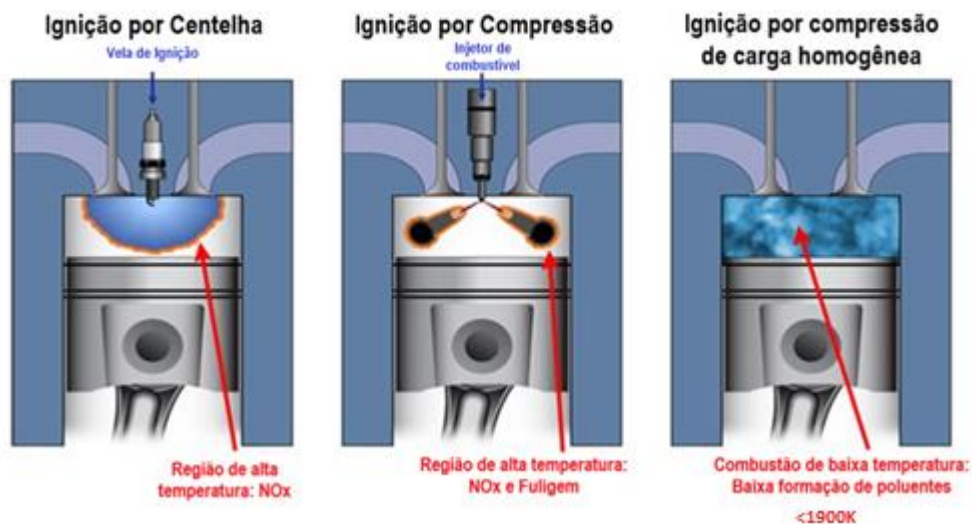
#### 2.1.1 Combustão HCCI

A ignição por compressão de carga homogênea (HCCI, do inglês *homogeneous charge compression ignition*), é um método de combustão misto que combina aspectos do ciclo Otto e Diesel. Dentre as características de ciclo Otto está, por exemplo, a utilização de misturas ar-combustível homogêneas com uma combustão próxima a volume constante, enquanto utiliza da ignição por compressão presente em motores ciclo Diesel. Em outras palavras, a combustão HCCI ocorre com combustível injetado no coletor de admissão ou diretamente no cilindro (no início da fase de admissão). Essa mistura ar-combustível é comprimida até a ocorrência de autoignição por compressão.

Embora o etanol hidratado tenha sido amplamente utilizado em motores SI, abordagens para o uso de etanol aquoso em motores de combustão interna também foram amplamente exploradas devido à crescente demanda por economia de energia e reduções de emissões em motores de combustão interna (WANG, 2022).

A Figura 1 compara os métodos de combustão previamente citados, e evidencia a diferença entre os métodos de ignição por centelha, compressão e compressão de carga homogênea. No modo de combustão HCCI, o combustível e o ar são pré-misturados como nos motores SI, e a mistura ar/combustível é comprimida até que toda a mistura reaja como nos motores de ignição por compressão (CI). Em outras palavras, ao utilizar o método de combustão HCCI pode-se obter as vantagens de ambos mecanismos SI e CI (CALAM, 2020.).

Figura 1: Diferenças entre os modos de combustão SI, CI e HCCI.



Fonte: Adaptado de William e Charles, 2011.

Com a utilização de combustão HCCI, toda a mistura ar-combustível admitida no cilindro é queimada ao mesmo tempo, o que proporciona a utilização de menos combustível e libera baixos índices de emissões (SHARMA; RAO; MURTHY, 2015). Isso acontece pois os pontos máximos de temperatura podem ser mantidos abaixo de 1800 K, que é comumente considerada a temperatura mínima necessária para formação de NOx (ZHAO, 2007). Outro fator importante acerca da combustão HCCI é que ela possui em altas velocidades de combustão, o que a faz aproximar de combustões a volume constante. Assim, a operação do motor torna-se mais eficiente, pois possui menor perda de calor para as paredes do cilindro durante a combustão e, também, pode-se extrair mais trabalho útil.

Apesar dos significativos ganhos da utilização do HCCI, alguns desafios da utilização também são presentes. Dentre eles destacam-se a estreita faixa de operação aplicável, detonação, falhas de ignição e altas emissões de monóxido de carbono (CO) e hidrocarbonetos (HC) (ÇELEBI, 2023). Alguns desses limitantes podem ser amenizados com a utilização do etanol, que possui alto número de octanas e características antidetonantes e alto calor latente de vaporização permitindo uma carga de ar-combustível mais densa e excelentes propriedades de queima pobre (MAURYA, R., 2011).

Outra complicação da utilização do modo de combustão HCCI é a dependência de estado térmico ao final da fase de compressão capaz de proporcionar a autoignição do combustível utilizado. Essa condição pode ser garantida pelo aquecimento do ar de admissão, pela utilização de EGR (*exhaust gas recirculation*), ou pelo aprisionamento de gases queimados através de estratégias de válvulas, de forma a manter parte dos gases quentes da exaustão no cilindro.

Feroskhan *et al.* (2021) discute a operação de um motor de Ignição por Compressão de Carga Homogênea (HCCI) usando uma mistura de metano e dióxido de carbono e éter dietílico (DEE) como combustíveis primário e secundário, e variando temperaturas de admissão entre 35 e 80 °C. Para obtenção dessas temperaturas utiliza-se do primeiro método anteriormente citado, através de um aquecedor instalado no coletor de admissão. Conclui-se, no artigo, que o processo de combustão no modo HCCI pode ser controlado de forma eficaz variando a taxa de fluxo de biogás, fração de metano e temperatura de entrada. De forma geral, a combustão é atrasada e a taxa máxima de liberação de calor é reduzida com o aumento da taxa de fluxo de biogás e fração de metano, enquanto o aquecimento da temperatura de admissão da mistura de ar-combustível tem o efeito oposto.

O segundo método de obtenção de HCCI é através da recirculação de gases de exaustão (EGR), onde os gases queimados são recirculados e agem como diluentes da mistura, reduzindo a taxa de liberação de calor. Nesse sentido, pode-se utilizar esses gases quentes também para controle de fase de combustão. Um exemplo desse método foi evidenciado por Martins *et al.* (2017), através da obtenção de parâmetros estáveis de combustão com a recirculação de gases queimados de um cilindro Diesel, utilizados para aquecer a carga de admissão de outros cilindros. Em ensaios posteriores, Martins *et al.* (2018) realizaram testes em modo HCCI com etanol hidratado com as razões de compressão de 16,6:1 e 14:1, de modo a obter melhor controle do início da combustão e detonação. Os resultados obtidos motivaram a redução da razão de compressão para 14:1, já que os resultados de eficiência indicada foram maiores para todas as misturas de etanol e água na razão de compressão reduzida.

Outro método para obter combustão HCCI controlável é usar sobreposição de válvula negativa (NVO), de forma a reter o gás queimado dentro do cilindro, fornecendo recirculação interna (dentro do cilindro) dos gases de escape. Hunicz *et al.* (2020) utiliza desse método e demonstra que a combustão HCCI usando NVO é limitada pela admissão de grandes quantidades de gases de escape residuais que reduzem aspiração de ar. No entanto, a extensão da faixa operacional HCCI pode reduzir as emissões globais e melhorar a eficiência térmica do motor, enquanto a limitação de aspiração possa ser mitigada pelo *boosting* (turboalimentação ou superalimentação), respeitando os limites de operação de alta carga e razão de aumento de pressão de pico.

A variação da temperatura de admissão possui maior influência sobre o ângulo de início da combustão ao utilizar HCCI como método de combustão. Dessa forma, maiores temperaturas na mistura ar-combustível admitida a aproxima das condições necessárias para a ignição, o que as antecipa quanto ao ângulo de virabrequim de início de combustão. Nesse aspecto, também é necessário considerar que o aumento da temperatura de admissão possibilita a geração de trabalho negativo através da antecipação do início de combustão a pontos anteriores ao ponto morto superior (CINAR *et al.*, 2015).

### **2.1.2 Cinética química**

A cinética química trata do estudo quantitativo da velocidade da reação química e dos fatores que a influenciam como: temperatura, pressão e concentração de espécies químicas. As reações químicas são conjuntos de fenômenos nos quais um reagente se dissocia ou duas ou mais substâncias reagem entre si, dando origem a diferentes compostos. Em muitos processos de combustão, as taxas de reação química controlam a combustão, a ignição e a extinção da chama (TURNS, 2012).

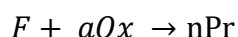
Um mecanismo de cinética química realiza o agrupamento de diversas reações elementares entre as espécies químicas estipuladas e que participam da reação química. Para os casos desses modelos aplicados a simulação de combustão em motores, consideram-se parâmetros como a velocidade das reações, colisões entre moléculas e suas frequências e, principalmente, as



quantidades de energia liberadas e consumidas pelas reações e seus produtos. Esses parâmetros são responsáveis por prever desde o início da combustão, sua duração, temperaturas máximas atingidas e determinarão a predição das emissões para os casos analisados.

### 2.1.2.1. Reações globais

Uma reação global representa uma aproximação teórica de múltiplas reações que ocorrem em um mecanismo de reação complexa, envolvendo um mol de oxidante e combustível e resultando em  $n$  mols de produtos. Essa reação pode ser representada através da seguinte forma:



Na equação acima,  $F$  representa o combustível,  $Ox$  representa uma unidade oxidante e  $Pr$  refere-se aos produtos da combustão. Por último, os coeficientes  $a$  e  $n$  representam a quantidade de mols de oxidantes e produtos necessários para a combustão.

Outra medida utilizada é a taxa de consumo do combustível, que pode ser expressado como

$$\frac{d[X_f]}{dt} = -k_G(T)[\text{Combustível}]^n[\text{Oxidante}]^m$$

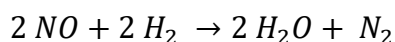
onde  $[\text{Combustível}]$  e  $[\text{Oxidante}]$  representam a concentração molar respectiva. A constante  $k_G$  representa o coeficiente de taxa global, e os índices  $n$  e  $m$  definem a ordem da reação, sendo determinados para mensurações de características da reação.

De forma geral, as reações globais são definidas como uma simplificação do mecanismo de reações e subprodutos que ocorrem na combustão (SARI, 2017). Ainda assim, a utilização de reações globais é amplamente utilizada em estudos que não necessitam da correta predição de produtos intermediários.

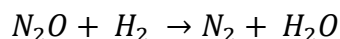
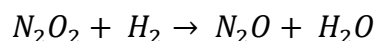
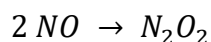
### 2.1.2.2. Reações Elementares

Dentro do total de reações químicas existente, sabe-se que a ampla maioria não ocorre em uma única reação. Em outras palavras, isso significa que muitas delas possuem etapas que se categorizam em uma sequência de eventos, que podem aparecer em sequências simples ou complexas.

A partir da informação anterior, pode-se caracterizar as reações elementares como um processo altamente probabilístico, onde diversas reações primárias ocorrem entre os reagentes e subprodutos, em reações posteriores. Para exemplificar, pode-se analisar as reações entre o ácido nítrico e o nitrogênio, que pode ser simplificada através da seguinte reação:

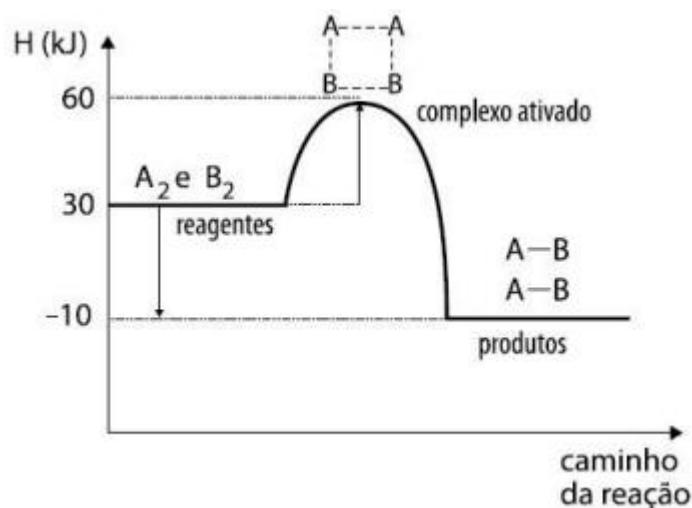


Analisando a equação anterior, nota-se que a probabilidade de ocorrência da equação simples e completa é muito baixa, pois necessitaria da colisão de todas moléculas reagentes. Desse modo, uma melhor análise do processo completo de reação seria representada por três diferentes reações. São elas:



Embora a reação comumente ocorra através das três reações anteriores, nota-se que os reagentes e produtos são os mesmos da reação mostrada na sua forma simples. Todavia, pode-se notar diferenças na energia da reação ao decorrer das reações intermediárias, visto que elementos podem coexistir com os choques entre as moléculas e, posteriormente ao fim da reação, devem retornar ao estado de menor energia. A figura 2, a seguir, representa essa diferença.

Figura 2: Gráfico de energia da reação ao decorrer da reação.



Fonte: Sari (2017).

### 2.1.3 Mecanismos de cinética química

Os mecanismos de cinética química utilizados na realização desse trabalho possuem duas versões distintas e oriundas do mecanismo cinético *NUI Galway*. A primeira versão é o *Detailed NUI Galway*, que é um mecanismo detalhado e chamado somente de *detailed* em suas referências no corpo desse documento. Essa versão detalhada possui 6 elementos químicos (carbono, hidrogênio, nitrogênio, oxigênio, argônio e hélio), 145 espécies químicas (dentre elas monóxido de carbono, peróxido de hidrogênio, hidroperoxila e metano, por exemplo) e 839 reações (CURRAN, 2010 e HEALY, 2010). O segundo modelo utilizado é o *Skeleton NUI Galway*, que se caracteriza por ser um modelo simplificado do mesmo mecanismo citado anteriormente, e é denominado nesse documento pela nomenclatura de *skeleton*. Por sua vez, esse modelo de cinética química possui os mesmos 6 elementos químicos, mas apresenta apenas 40 espécies químicas e 181 reações (LU, 2014). Um resumo dessas informações é mostrado abaixo, na tabela 1.

Tabela 1: Características de composição dos modelos de cinética química.

Mecanismo	Nº de elementos	Nº de espécies	Nº de reações
Detailed	6	145	839
Skeleton	6	40	181

Diversos artigos utilizam diferentes variações do mecanismo *skeleton* de Lu, variando de acordo com a quantidade de reações e alvos de aplicações. Edler (2017), por exemplo, utiliza uma versão skeletal com 17 espécies químicas para comparar simulações com dados experimentais em reações de partículas em um Reator Flash de combustão. O mesmo autor utiliza o modelo para adequação de parâmetros do sistema, e conclui que as tendências das simulações se adequam aos dados experimentais e atendem as expectativas de baixa utilização computacional.

Ambos os modelos são recomendados e validados por Bragatwala (2014) para operações com pressões entre 1 e 150 atm, razão de equivalência de 0,3 a 1,1 e temperatura inicial de autoignição de 700 a 1600K. Desse modo, assegura-se dizer que ambos modelos de cinética química atendem aos principais requisitos para aplicação na predição de combustão HCCI, já que atendem aos limites de operação impostos. Através de comparações com testes experimentais, o mesmo autor consegue comprovar boas correlações dos modelos com os parâmetros de atraso de ignição e velocidades laminares de chama pré-misturada.

#### 2.1.4 Simulação computacional em motores de combustão interna

A simulação computacional é entendida como o conjunto de modelos matemáticos aplicada em softwares de utilização, e atualmente compreendem diversas aplicações. Em quaisquer utilizações, os principais motivos para sua utilização são a facilidade de testes e variações de parâmetros, além de se justificar como uma solução para realização de testes mais rápida e com menores custos frente aos testes experimentais, quando validados através uma série de testes e comparações com ciclos experimentais.

Aplicados a realidade de motores de combustão interna, as simulações computacionais facilitam a investigação do comportamento de um motor sob diferentes parâmetros estipulados pelo usuário. O estado da arte atual para simulações termodinâmicas e de dinâmica de gases de motores de combustão interna é o software GT-Power. O GT-Power é uma ferramenta do conjunto de softwares GT-SUITE, que possibilita a simulação e incorpora modelos de CFD-1D (fluidodinâmica computacional unidimensional, do inglês *computer fluid dynamics one-dimensional*) e combustão, o que possibilita a criação de modelos de motores (BARBOSA JUNIOR, 2023).

O software utiliza-se de simulação unidimensional em volumes finitos, permitindo ao usuário trabalhar com objetos configuráveis, conjuntos e bibliotecas, onde busca resolver as equações de energia, massa e quantidade de movimento para cada um dos citados. Desse modo, o GT-Power calcula a equação de conservação de quantidade de movimento para todo duto reto, enquanto aplica coeficientes de descarga às conexões, reduções de duto e válvulas.

As aplicações desse programa estendem-se ainda para diversas outras aplicações, como estudos de acústica, análises de sistemas de admissão e exaustão, controles em geral e muitas outras.

A integração de mecanismos de cinética química ao GT-Power é possível através do objeto *EngCylCombHCCI*, disponível da biblioteca do próprio software. Opcionalmente, nesse objeto, podem ser inseridas informações acerca da combustão esperada. Pode-se integrar a esse modelo qualquer arquivo e extensão que possua o formato *ChemKin*. Esse formato é determinado padrão para apresentação e interpretação de mecanismos de cinética química, e utiliza uma base de dados que contém ajustes polinomiais para calores específicos, entalpias de estado padrão e entropias de estado padrão em um formato pré-definido, reconhecido pelos softwares utilizadores (TANIGUCHI, 2022).

A utilização de modelos de cinética química pode ocorrer de diversas formas através do GT-Power, atuando como suporte ou análise completa da combustão. Fagundez (2020) utiliza o software para mensurar pressões de cilindro e condições de temperatura, para serem posteriormente processadas externamente pelo mecanismo de cinética química. Salih (2018) utiliza-se de um mecanismo de cinética química atrelado ao GT-Power para predição de knock, evidenciando um caso de maior impacto na pressão de cilindro e combustão dos ciclos analisados. Outro caso semelhante é representado pelo estudo de Bellis (2022), que incorpora mecanismos detalhados de cinética química ao GT-Power para predição do instante de autoignição em simulações de Motores HCCI alimentados com hidrogênio e combustíveis à base de carbono.

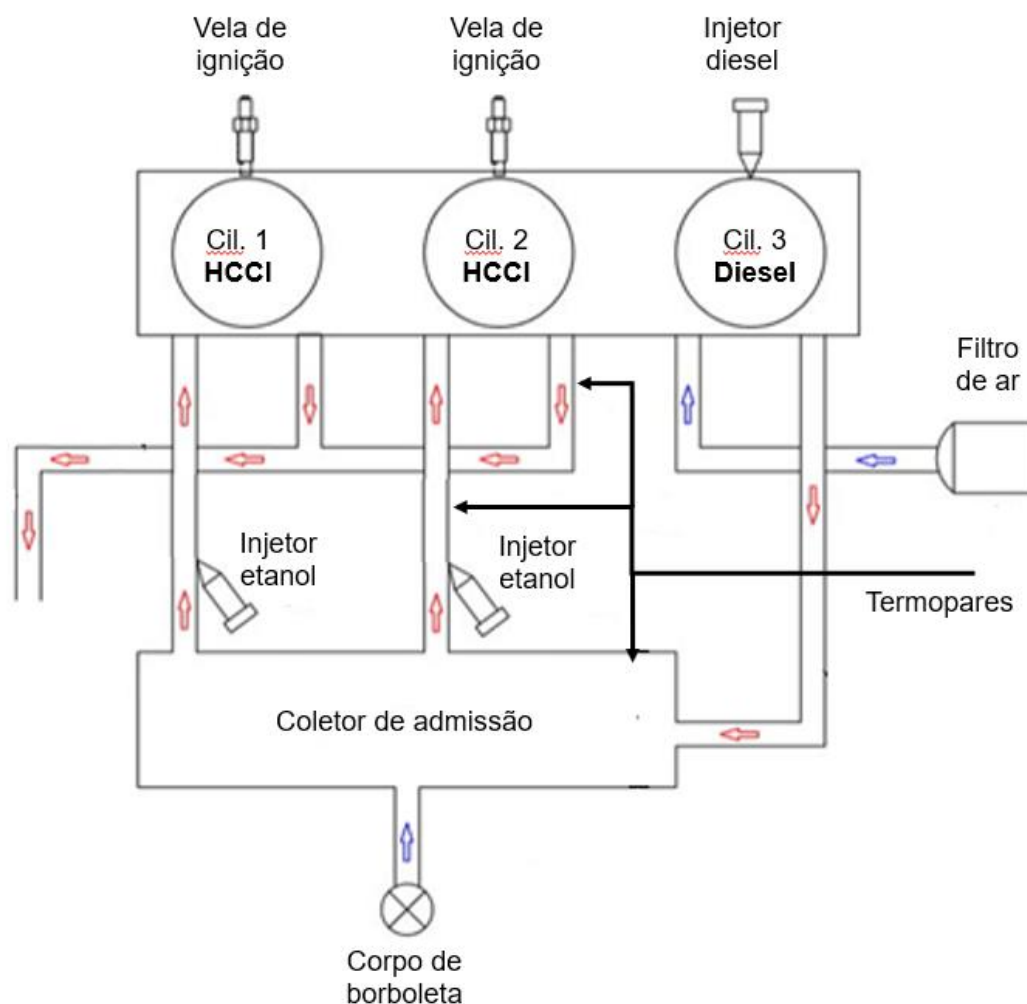
## 2.2 MATERIAIS E METODOLOGIA

### 2.2.1 Adaptação de um motor Diesel para etanol de HCCI

O motor modelado e utilizado na realização dos testes experimentais foi um motor MWM D229-3 de três cilindros, Diesel, naturalmente aspirado e de volume total deslocado de 2,94 litros. Todavia, em trabalhos anteriores esse motor foi convertido para operação com etanol, através da conversão de dois cilindros originais Diesel para HCCI.

De forma a possibilitar a operação com o modo HCCI e proporcionar condições favoráveis à autoignição, os gases queimados provenientes da combustão do único cilindro Diesel restante foram reaproveitados, redirecionando-os para um coletor de admissão. Além da função básica de alimentação para os dois cilindros etanol HCCI, nesse coletor foram instalados uma válvula e corpo de borboleta, injetores do tipo PFI (do inglês *port fuel injection*), sensores de excesso de oxigênio de banda larga (também conhecidos sonda lambda) e termopares. Além do coletor de admissão, o motor possuía um coletor de exaustão para os dois cilindros HCCI, também equipados com sonda lambda apresentando pontos de instalação de dispositivos de análise de gases e termopares. A Figura 3, a seguir, ilustra o aparato experimental utilizado nos testes, bem como os pontos analisados quanto a sensores aplicados para seu controle.

Figura 3: Esquema do motor com suas modificações.



Fonte: Adaptado de PERIN, 2018.

Os pontos escolhidos para instalações das conexões utilizadas para análise de gás ficam nos dutos de admissão e exaustão do cilindro equipado, de forma a captar as diferenças de composição em instantes anteriores e posteriores à combustão HCCI. As tomadas de temperatura, por sua vez, foram realizadas no plenum, admissão e exaustão do mesmo cilindro.

Além do aparato que possibilita a utilização de EGR (do inglês *exhaust gas recirculation*), outras mudanças na configuração original do motor foram necessárias: A primeira delas é a referente a injeção de etanol, que foi possibilitada pela instalação de uma linha de alimentação formada por um eletroinjetor automotivo, filtro de combustível e bomba elétrica. Também foram instalados uma roda fônica de 60-2 dentes e um sensor indutivo, responsável



por aferir a posição angular do virabrequim. Essa informação foi utilizada para definição dos momentos de injeção, que foram realizados através de uma unidade de controle eletrônica (ECU) Megasquirt, que também possibilitou o ajuste da quantidade de combustível injetado em tempo real.

Além dessas mudanças externas ao motor, foi necessário reduzir a razão de compressão dos cilindros HCCI para 14:1. Os parâmetros gerais utilizados nos testes experimentais são mostrados a seguir, na Tabela 2.

Tabela 2: Parâmetros do motor.

Parâmetro	Modified	Standard
Cilindros	1 e 2	3
Modo de combustão	HCCI	CI
Combustível	Etanol	Diesel
Sistema de injeção	PFI	DI
Razão de compressão	14:1	16.6:1
Arrefecimento	Água	
Diâmetro (mm)	102	
Curso (mm)	120	
Comprimento da biela (mm)	207	
Válvulas por cilindro	2	
Volume deslocado (cm <sup>3</sup> )	980.3	
Rotação (rpm)	1800	

### 2.2.2 Instrumentação para aquisição de dados

Os pontos operacionais escolhidos para análise dos modelos de operação são realizados em três distintos pares de testes operacionais. Entre os pares, buscou-se a utilização de parâmetros operacionais similares, ou seja, alterando o mínimo possível das condições de contorno para observação da alteração da combustão para somente do parâmetro alterado (temperatura de admissão ou combustível utilizado).

Inicialmente, falar-se-á sobre as configurações dos sensores utilizados, dando foco inicial aos termopares de tipo K utilizados. Essa categoria de termopares possui utilizações gerais, e destaca-se por ser resistente a oxidação

em altas temperaturas e ter baixo custo. Além disso, vale pontuar que os termopares de tipo K possuem uma região de aplicação de -200 a 1260 °C, atendendo com sobra às necessidades de utilização desse caso. Os sensores lambda foram utilizados, por sua vez, para determinar a razão ar-combustível das misturas admitidas pelo cilindro HCCI e, também, presentes em suas emissões. Os sinais obtidos desses sensores passam por um condicionador de sinais, responsável pelos filtros e conversões aplicadas.

Um sensor de pressão piezoelétrico GH14D foi utilizado para medição da pressão de cilindro, que emite sinais em milivolts que são submetidos a um condicionador de sinais, para posteriormente ser convertido em valores de pressões através de uma conversão obtida no documento do sensor. Esse aparato foi instalado no cabeçote do cilindro HCCI equipado, e possui faixa de operação entre 0 e 250 bar. O referenciamento do ângulo de virabrequim atrelado às pressões adquiridas foi realizado através de um encoder incremental, que, como mencionado anteriormente, é posicionado junto ao virabrequim.

Os sinais anteriormente citados foram enviados para uma placa de aquisição da marca National Instruments. Posteriormente, os sinais emitidos foram captados por uma rotina desenvolvida em LabVIEW, responsável por informar os parâmetros de forma visual e que permite a captação dos dados à solicitação do operador. Os dados acerca dos pontos experimentais foram salvos e possuem análise de 100 ciclos quanto a pressão de cilindro, e 200 ciclos analisados para averiguar a média de dados como temperaturas e pressões ambiente.

A medição de combustíveis injetados (etanol e diesel) foi controlada através de tomadas de tempo e análise volumétrica consumida, através de uma bureta graduada. De forma a reduzir os erros de leitura e de leitura de tempo consumido, realizam-se três medições para cada ponto experimental, utilizando a média desses.

### **2.2.3 Procedimento de testes de motor em bancada**

Os testes experimentais foram realizados com rotação fixa de 1800 rpm, já que o motor em questão é parte de conjunto gerador de energia elétrica. Esse

conjunto foi utilizado para gerar carga no motor através da utilização de resistências, instaladas na parte exterior do prédio em uma caixa d'água. A ativação dessas cargas foi realizada pelo operador dos testes experimentais, de acordo com as necessidades e condições estipuladas.

O primeiro par de testes foi realizado com duas resistências ativas, tendo carga de 9 kW enquanto os demais possuíam de somente 5 kW.

Antes das aquisições de dados, cada ponto experimental foi estabilizado quanto às suas temperaturas de admissão e IMEP por dois minutos.

Os primeiros quatro pontos experimentais foram realizados com combustível E93W07, ou seja, etanol hidratado com 7% de água em volume. Para as duas últimas análises, utilizam-se etanol anidro e, posteriormente, E80W20 (etanol hidratado com 20% de água em volume).

Os dados experimentais obtidos foram pós-processados em uma rotina de MATLAB, responsável por fornecer dados acerca das taxas de liberação de calor aparente (AHRR). A utilização do AHRR para análise dessas características desconsidera as transferências de calor para as paredes do cilindro. A utilização do AHRR é comumente utilizada na literatura, conforme mostram os estudos acerca de métodos de detecção de detonação baseado na posição angular dos parâmetros de combustão (GOLKE, 2022) e testes experimentais de um motor HCCI a etanol utilizando injeção de água (TELLI, 2022).

Ademais, a utilização do AHRR para comparativos de energia liberada por ângulo de virabrequim torna-se mais promissora quando aplicada a modelos computacionais de simulação, já que não requer definições demasiadamente precisas de transferência de calor dentro do modelo ao qual o mecanismo será aplicado. A equação utilizada para a conversão dos parâmetros, pressões e ângulos de virabrequim é mostrada a seguir.

$$AHRR = \frac{1}{k-1} \left( kp \frac{dV}{d\theta} + \frac{VdP}{d\theta} \right)$$

A equação de AHRR acima representa um modelo simples para a análise da liberação de energia que assume uma mistura uniforme e um estado

termodinâmico com comportamento de gás ideal em todos os locais do cilindro durante o processo ativo de combustão.

Os dados de pressão e AHRR por ângulo de virabrequim obtidos através da simulação no GT-Power foram exportados, e utilizados em diferentes plataformas para possibilitar melhor análise. Inicialmente, utilizou-se o Microsoft Excel para comparativos de erro, enquanto a elaboração dos diagramas de pressão e AHRR foi facilitada através do software Microsoft PowerBI.

O presente trabalho busca demonstrar a análise de seis diferentes pontos de operação, citados brevemente quanto aos seus parâmetros de condições de contorno, e são mostrados a seguir na Tabela 3. Esses pontos de operação representam, em ordem, casos de alta carga aplicada ao conjunto motor-gerador, utilização de alta fração de EGR através da nulidade do TPS (do inglês *throttle position sensor*) e, por último, a utilização de diferentes combustíveis. Os resultados serão posteriormente discutidos, utilizando-se da sequência do índice apresentado.

Tabela 3. Pontos de operação e parâmetros de controle.

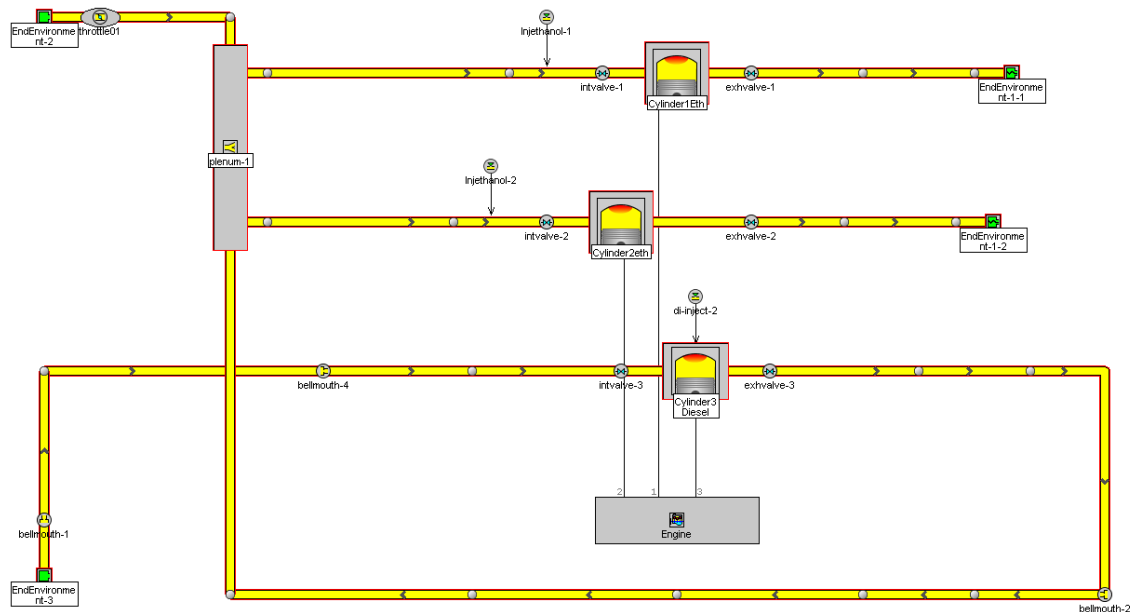
Índice	Temperatura admissão etanol	TPS plenum	Potência (kW)	Carga (IMEP)	Combustível	$\lambda$ Diesel	$\lambda$ Etanol
1	200 °C	90°	9 kW	2,46	E93W07	2,00	1,39
2	252 °C	90°	9 kW	1,88	E93W07	1,61	1,27
3	201 °C	0°	5 kW	1,40	E93W07	2,40	1,41
4	249 °C	0°	5 kW	0,95	E93W07	2,05	1,39
5	206 °C	90°	5 kW	2,78	E100	1,90	1,34
6	202 °C	90°	5 kW	2,25	E80W20	1,57	1,16

#### 2.2.4 Modelagem numérica do modelo de simulação

Nesse subcapítulo estarão presentes as considerações e premissas utilizadas para o desenvolvimento e modelagem das simulações. A modelagem numérica aplicada às simulações de GT-Power visa sanar parâmetros não controlados ou que não foram possíveis de mensurar com a configuração experimental utilizada nos testes de bancada. O modelo desenvolvido e utilizado

para a simulação dos testes experimentais (exemplificados nos próximos capítulos) é mostrado na Figura 4.

Figura 4: Modelo unidimensional da configuração do motor utilizado.



Fonte: Autor (2022).

O tempo de processamento médio requerido para cada simulação depende do modelo e configuração do hardware utilizado, mostrado na Tabela 4.

Tabela 4. Configurações computacionais utilizadas.

Marca	Lenovo
Processador	Intel® Core™ i7
CPU	6500U @ 2.50GHz
<i>Random Access Memory (RAM)</i>	8 GB
Sistema operacional	Windows 10 Pro
Arquitetura computacional	64 bits

Como os gases da exaustão do cilindro Diesel interferem completamente nas condições de contorno e análise do cilindro HCCI, deve-se garantir que eles estejam coerentes com os adquiridos experimentalmente. Todavia, o cilindro Diesel não possuía instrumentação interna ao cilindro, portanto algumas

premissas foram utilizadas no decorrer das simulações. O primeiro ponto é caracterizar as condições do gás de admissão, e para isso utilizou-se a pressão, umidade e temperatura ambiente do dia de cada teste experimental. Não havia sensor de vazão mássica aplicada à admissão do cilindro Diesel, e para contornar a ausência desse parâmetro de condição de contorno foi utilizado o consumo de combustível do cilindro e um controlador PID (proporcional integrativo derivativo). Juntamente com o  $\lambda$  previamente estipulado (através dos testes experimentais), esse controlador atua no coeficiente de descarga do duto de admissão com objetivo de igualar a vazão mássica da simulação à observada nos testes de bancada. A combustão utilizada foi pré-modelada e aplicada a todos os pontos experimentais. Algumas características dos gases de exaustão desse cilindro são utilizadas como condições de contorno dos próximos cilindros HCCI observados, como a fração de EGR, por exemplo.

A configuração de sensores utilizada nos testes experimentais possibilitou a aquisição de dados de temperatura na exaustão Diesel, pleno e admissão dos cilindros HCCI. Essas temperaturas são corrigidas nos modelos de simulação através de atuadores, que mudam a temperatura das paredes dos dutos. Algumas condições de contorno do cilindro HCCI dependem do ponto experimental observado, variando de acordo com a admissão ou não de ar ambiente no pleno após o cilindro Diesel.

Os pontos operacionais de alta fração de EGR (subcapítulo 3.1.2) possuem menor interferência externa e um melhor ambiente controlado. Isso ocorreu, principalmente, pela certeza de que todo ar admitido no cilindro HCCI é proveniente da exaustão do cilindro Diesel, anteriormente caracterizado. Utiliza-se como condição de contorno desse cilindro o consumo de combustível por cilindro, e a vazão mássica de oxigênio é validada através da comparação dos valores simulados (frente aos experimentais) de  $\lambda$  após a exaustão do cilindro HCCI instrumentado.

Os pontos de operação dos subcapítulos 3.1.1 e 3.1.2 possuem o ângulo de abertura do corpo de borboleta do pleno de admissão totalmente aberto, e desse modo permitem a admissão de ar ambiente à zona controlada. Como não há um sensor de vazão mássica para medição de ar ambiente admitido nesse local, deve-se atribuir um valor de coeficiente de descarga para esse corpo de

borboleta. Isso é feito de forma semelhante à caracterização anterior do cilindro Diesel, ou seja, atribui-se a massa de etanol consumida por ciclo como condição de contorno e o  $\lambda$  experimental (mensurado no duto de exaustão do cilindro instrumentado) como objetivo do atuador PID que controla o coeficiente de descarga do corpo de borboleta do plenum.

Como não havia instrumentação experimental para aquisição de todos os dados necessários, foram realizados cálculos para determinar alguns dos parâmetros citados anteriormente, e podem demonstrar incertezas, especialmente porque carregam algumas premissas. A primeira hipótese utilizada nas simulações é de que o modelo de combustão do cilindro Diesel possui eficiências de combustão similares às experimentais, pois afeta a fração de EGR e os produtos da combustão que serão posteriormente utilizados pelos modelos de cinética química. A segunda hipótese considerada nesse trabalho é de que não há perda de EGR para o ambiente, somente podendo acontecer admissão de ar ambiente em alguns dos pontos operacionais.

Por fim, considera-se que a divisão do ar presente no pleno anterior aos cilindros HCCI é somente influenciada pela ordem de ignição dos cilindros, já que o pleno é um objeto não modelado no GT-Power e não há informação experimental sobre diferença entre as frações mássicas e de EGR admitidas entre os dois cilindros HCCI (equipado e não equipado).

### **2.2.5 Métodos de análise de diagramas de pressão e AHRR**

Como a análise visual dos gráficos é pessoal e tendenciosa, buscou-se comprovar também de forma numérica as aproximações entre os diagramas de pressão. Para isso, dois tipos de coeficientes são utilizados, com distintos vieses.

O primeiro método utilizado para análise numérica das curvas de pressão é o coeficiente de determinação, também conhecido como  $R^2$ . O coeficiente de correlação ( $R$ ) é um método estatístico de análise entre variáveis, que mede a força e a direção de uma relação linear. O coeficiente de determinação, por sua vez, é um parâmetro de ajuste linear generalizado. Esse coeficiente expressa a proporção da variação através de resultados entre 0 a 1, e quanto maior o valor

retornado, mais adequado é o modelo para descrever o comportamento do fenômeno. Sua respectiva equação pode ser encontrada a seguir.

$$R^2 = \left( \frac{\sum(PM - \overline{PM})(\theta PM - \overline{\theta PM})}{\sqrt{\sum(PM - \overline{PM})^2 \cdot \sum(\theta PM - \overline{\theta PM})^2}} \right)^2$$

O coeficiente de determinação (e também o de correlação) pode ser acurado em comparações de variações entre duas curvas, mas falha em analisar diferenças entre valores absolutos. Um exemplo dessa fraqueza pode ser efetivado pela elaboração do coeficiente de determinação entre duas curvas iguais, mas com deslocamento positivo ou negativo. O valor retornado para essa análise será 1, que representa extrema correlação entre os pontos e variações aplicadas. De forma a realizar outra análise de erro utiliza-se a média do erro relativo normalizado e absoluto, que é utilizado para comparações de erro entre duas variáveis.

$$\varepsilon_{RN} = \frac{\sum \left| \left( \frac{P_{mecanismo}}{P_{real}} - 1 \right) \right|}{n}$$

Utiliza-se a versão normalizada e absoluta desse tipo de erro pois considera o mesmo erro proporcional para valores simulados superiores ou inferiores ao valor real.



### 3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

O trabalho em questão teve como meta viabilizar a utilização de modelos de cinética química para análises e simulações com combustão não-preditiva, justificando valores simulados e comparados com os obtidos em um ciclo real através da obtenção dos seus diagramas de pressão e dados referente a combustão, composição e consumo.

Embora o intuito inicial do trabalho fosse caracterizar a combustão das simulações através de uma maior gama de temperaturas de admissão (realizadas também em bancadas dinamométricas), ressalta-se que esse parâmetro é instável para o motor e sua característica de operação no momento dos testes experimentais. Desse modo, optou-se por reduzir o número de análises, mantendo somente as temperaturas comuns de estabilização (200 e 250 °C de admissão no cilindro HCCI etanol instrumentado) em todos as cargas e métodos de análise realizados.

Para melhor entendimento dos dados, essa seção será inicialmente dividida entre análises de diagramas de pressão para os diferentes modelos de cinética química utilizados e seus respectivos custos operacionais.

#### 3.1 ANÁLISE DE DIAGRAMAS DE PRESSÃO E AHRR

Diferentes testes experimentais foram motivados para verificar o comportamento das comparações dos diagramas de pressão e AHRR obtidos na simulação através de mecanismos de cinética química, como alta potência aplicada, alta fração de EGR e diferentes hidratações de combustível. Dentro de cada um desses citado estão presentes dois testes de bancada, que tiveram suas características analisadas e posteriormente inseridas no software de simulação GT-Power.

##### 3.1.1 Pontos operacionais de alta carga

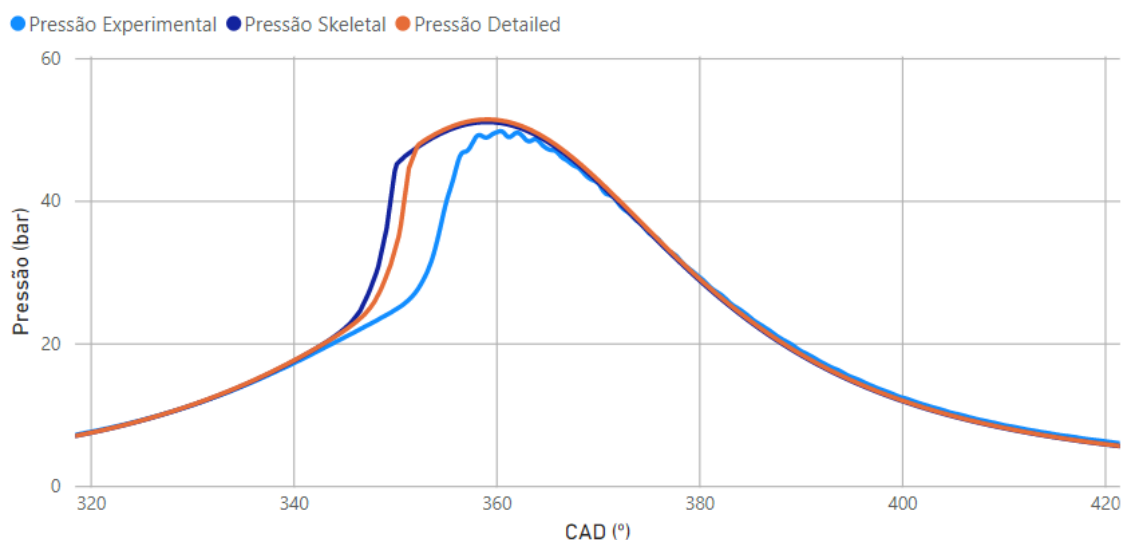
Os dois primeiros pontos operacionais escolhidos para comparação representam condições de alta carga aplicada ao conjunto motor-gerador (referente aos testes com potência de 9 kW), e serão utilizados como pontos de operação basais para as comparações realizadas nos subcapítulos seguintes.

Ressalta-se, todavia, que essa carga é aplicada aos três cilindros em conjunto, não fazendo menção somente a solicitação aplicada ao cilindro HCCI equipado com aparato sensorial para testes de bancada. Os testes desse subcapítulo visam verificar a acuracidade na previsibilidade dos dados de combustão dos modelos de cinética química em suas aplicações para combustão sem restrição de entrada de ar ambiente no pleno, observando suas diferenças em aplicações semelhantes e de temperaturas de admissão diferentes (200 e 252 °C).

O primeiro ponto escolhido para comparação desse subcapítulo possui características de 200 °C no coletor de admissão do cilindro HCCI equipado e foi realizado sem restrição de admissão de ar ambiente no plenum. O diagrama de pressão experimental desse ponto é mostrado a seguir na Figura 5, junto com os diagramas oriundos da simulação computacional com os modelos de cinética química previamente citados.

Figura 5: Diagramas de pressões: Teste basal – Caso 1.

Diagrama de Pressões vs. CAD: Testes Basais - Case 001



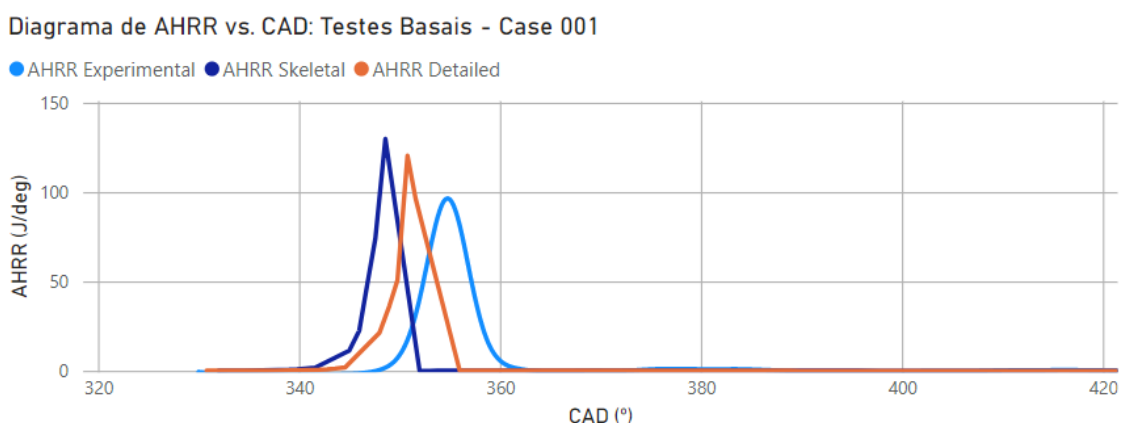
Fonte: Autor (2022).

Através da análise visual na Figura 5 verifica-se que os modelos de cinética química apontam para um início de combustão adiantado frente ao teste experimental, evidenciado pelo incremento significativo da pressão. Nota-se também uma maior variação da pressão nesse período, fato que poderia instigar uma maior velocidade de combustão. O fato é evidenciado pela análise do parâmetro CA1090 (duração entre 10 e 90% do total da combustão em função

do ângulo de virabrequim), que tem valores de  $5,6^\circ$  para o ciclo real,  $3,4^\circ$  para o modelo skeleton e, por último, de  $3,7^\circ$  para o detailed. As durações de combustões evidenciadas com a utilização de combustão HCCI são reduzidas quando comparadas com outros métodos (como ignição por centelha ou compressão), já que a câmara é considerada homogênea quanto a carga e mistura ar-combustível e a temperatura dessa carga admitida é muito elevada, o que possibilita diversos focos de combustão simultâneos.

Os parâmetros de ângulo de início de combustão e a sua respectiva duração podem também ser avaliadas nos diagramas de pressão desse ponto operacional, demonstrado na Figura 6.

Figura 6: Diagramas de AHRR: Teste basal – Caso 1.



Fonte: Autor (2022).

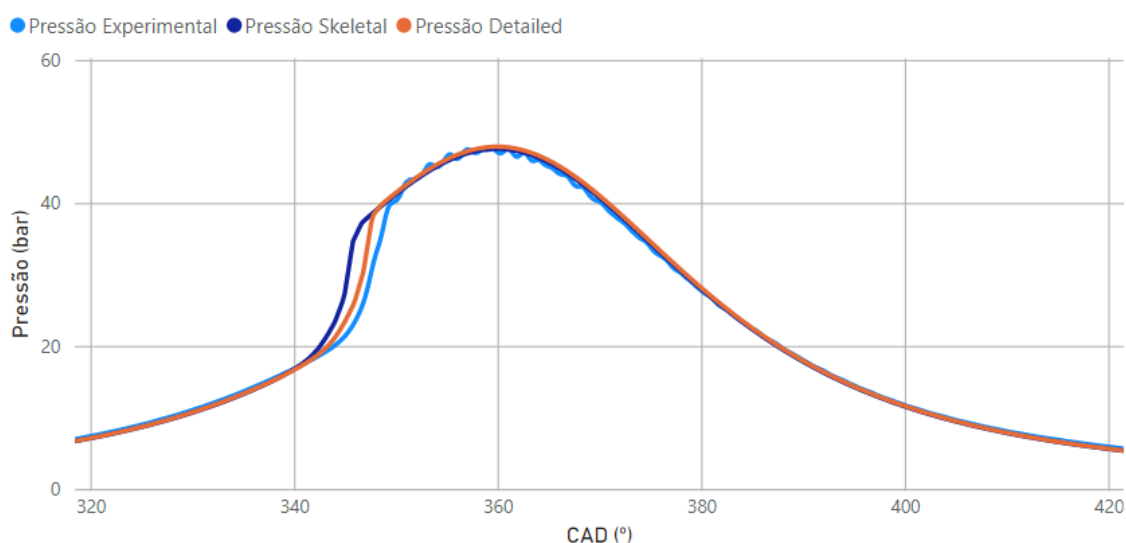
Ambas as combustões previstas pelos modelos de cinética química aplicados ao caso 1 preveem o início de combustão antecipada quando comparado com o ciclo experimental, mas evidencia-se através da análise das taxas de liberação de calor aparente, mostrados na Figura 6, que o modelo detalhado possui uma melhor previsibilidade quanto a esse aspecto. Outro ponto a ser analisado é a diferença entre as máximas liberações de calor por ângulo, onde o modelo skeleton possui um resultado mediano em comparação ao ciclo real e o modelo detailed possui maior correlação entre os diagramas.

O segundo ponto de operação possui características operacionais semelhantes ao primeiro, citado anteriormente. Dentro das limitações de

operação, buscou-se somente elevar a temperatura de admissão do cilindro HCCI para 252 °C. Para realização desse aumento de temperatura, foi escolhido manter a posição do TPS e diminuir o IMEP do cilindro HCCI, de modo a exercer maior injeção de diesel e aumentar a temperatura de exaustão do cilindro que alimenta os demais com EGR. A comparação entre os diagramas de pressão obtidos para esse segundo ponto de observação é mostrada em sequência, na Figura 7.

Figura 7: Diagramas de pressões: Teste basal – Caso 2.

Diagrama de Pressões vs. CAD: Testes Basais - Case 002



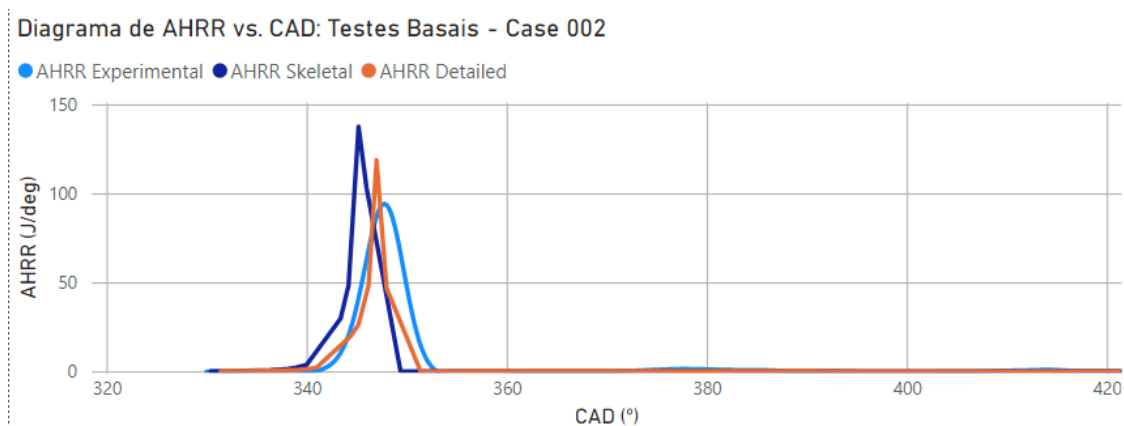
Fonte: Autor (2022).

Através da Figura 7, visualiza-se que os diagramas de pressão ainda possuem uma diferença quanto ao ponto de início de combustão, mas que se aproximam mais do padrão observado no teste experimental quando comparados com o caso anterior. O CA1090 desse ciclo real foi estimado em 4,6° frente a 3,51 e 3,54 para os modelos de cinética skeleton e detalhado, respectivamente. Embora essa duração de combustão seja mais próxima do que a apresentada no ciclo anterior, ressalta-se que os valores das simulações entre os casos de 200 e 250°C variaram pouco entre si. Esse fato, pode significar que o ajuste das condições de contorno pelo modelo computacional tenha maior sucesso para o caso de 252 °C. Desse modo, recomenda-se que os parâmetros

tenham essas condições ajustadas para que menores temperaturas de admissão tenham a mesma proximidade. A alteração desses parâmetros pode ser aplicada aos mecanismos de cinética química através da alteração dos valores de taxa de reação para as reações elementares que formam o corpo de reações do mecanismo cinético. O ajuste dessas taxas de reação terá impacto direto na velocidade de liberação de calor observada durante a combustão.

Os diagramas de AHRR para esse segundo ponto operacional observado são mostrados abaixo, na Figura 8.

Figura 8: Diagramas de AHRR: Teste basal – Caso 2.



Fonte: Autor (2022).

A análise do diagrama de liberação de calor aparente repete as condições observadas no diagrama de pressão desse caso, aproximando os valores de início de combustão e, também, os picos de liberação de calor. Vale ressaltar que o perfil desse diagrama é mais próximo do que o caso com menor temperatura de admissão, e novamente o modelo detailed tem maior eficácia na predição de combustão e possui uma redução do erro absoluto quando comparado ao caso anterior.

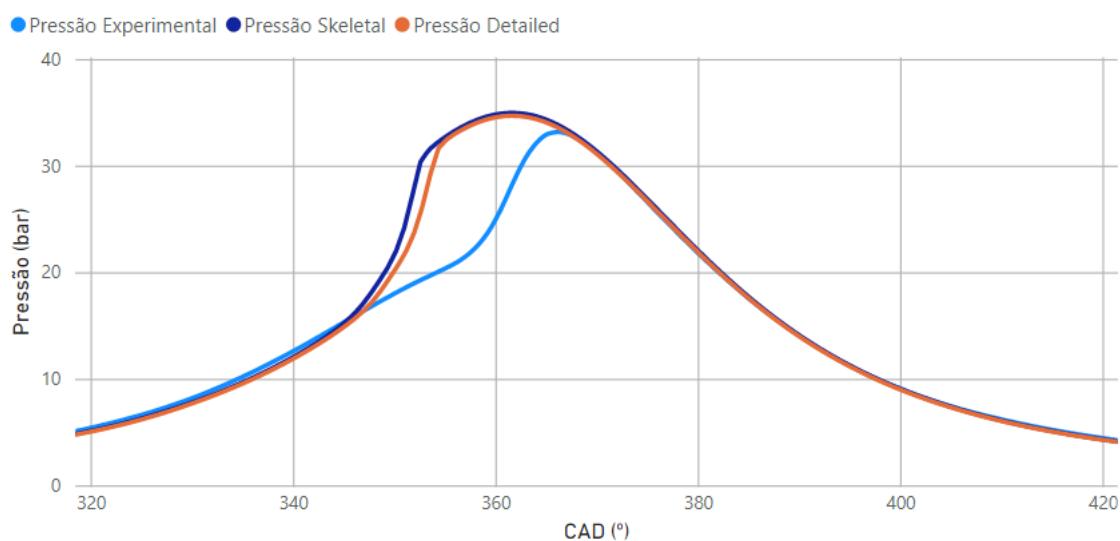
### 3.1.2 Pontos operacionais de alta fração de EGR

Posteriormente aos testes basais realizados, buscou-se observar a influência do EGR na emulação de combustão prevista pelos dois modelos de cinética química. Os testes experimentais com alta fração de EGR foram

realizados com o corpo de borboleta presente na entrada de ar ambiente do *plenum* totalmente fechada, com o intuito de preservar somente o gás oriundo da combustão do cilindro Diesel para a alimentação dos cilindros HCCI. Para realização de comparativos quanto aos efeitos da alteração de temperatura de admissão do cilindro HCCI, novamente foram realizados dois testes experimentais, com o respectivo parâmetro em 201 e 249 °C. Como esse regime possui pouco oxigênio disponível para a combustão de HCCI, os pontos analisados possuem menor injeção de combustível, e resultam em menores pressões máximas obtidas. O diagrama de pressões do primeiro caso desse subcapítulo (terceiro ao total) é mostrado a seguir, na Figura 9.

Figura 9: Diagramas de pressões: Alto EGR – Caso 3.

Diagrama de Pressões vs. CAD: Alto EGR - Case 003



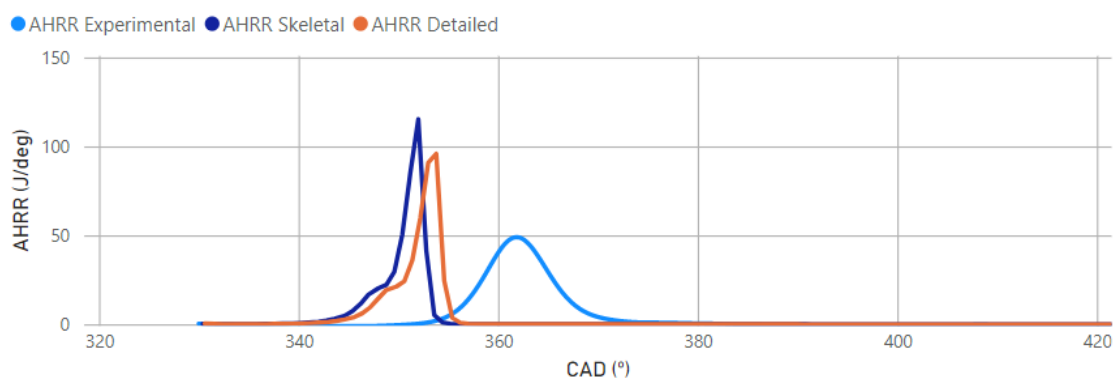
Fonte: Autor (2022).

O diagrama da pressão obtido em testes experimentais para esse caso (Figura 9) mostra um atraso no início da combustão, não evidenciado pelas predições dos modelos de cinética química. Todavia, embora o ponto de autoignição não tenha sido corretamente predito, percebe-se uma semelhança na duração da combustão, já que o CA1090 é de 7,6°, 6,2° e 6,3°, respectivamente para o ciclo experimental, skeleton e detailed. O aumento da duração de combustão (evidenciado pela diferença do CA1090 entre os subcapítulos 3.1.1 e atual) é esperado, já que o alto teor de EGR admitido no cilindro HCCI é responsável pela redução da velocidade de queima e

temperatura máxima. Segundo Oalekan (2011), a redução de temperatura máxima de combustão com uso de EGR ocorre, pois, a capacidade específica de calor de dióxido de carbono e da água (produtos da combustão Diesel anterior) são maiores, absorvendo mais calor da combustão.

Figura 10: Diagramas de AHRR: Alto EGR – Caso 3.

Diagrama de AHRR vs. CAD: Alta Fração EGR - Case 003



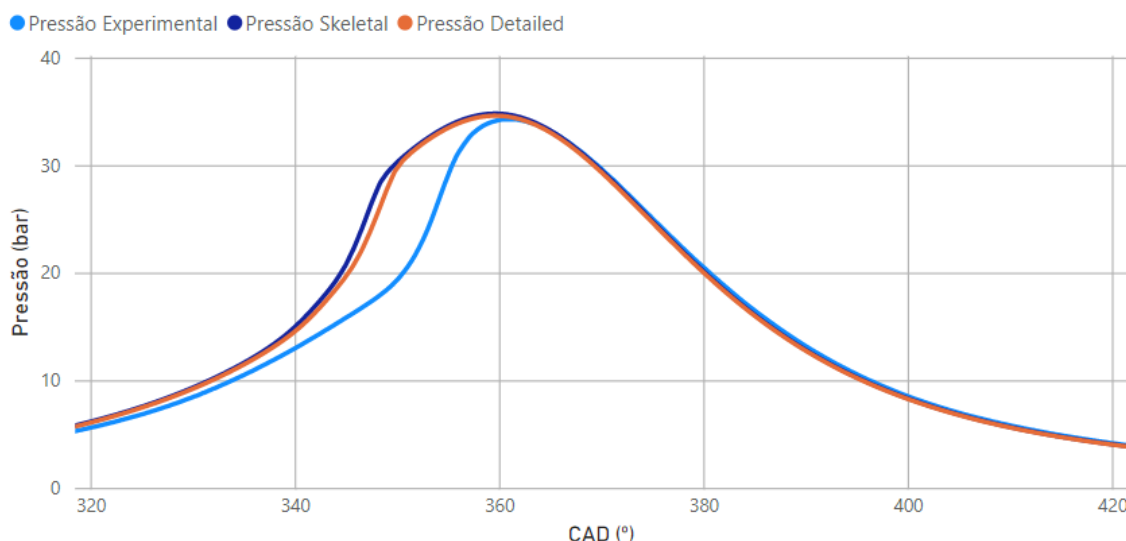
Fonte: Autor (2022).

Ao analisar o diagrama de AHRR para o ponto de operação atual na Figura 10, verificamos a predição do início de combustão antecipada previsto por ambos modelos de cinética química. Outro ponto observado é o pico elevado de liberação de calor aparente evidenciado pelos modelos, cerca de duas vezes maior do que o apresentado pelo teste experimental.

Da mesma forma que o subcapítulo anterior, o segundo ponto operacional escolhido com alta fração de EGR busca avaliar a diferença na predição dos modelos de cinética química para uma maior temperatura de admissão, desempenhada em 249°C e mantendo a restrição total na entrada de ar ambiente ao plenum. O diagrama de pressões real e simuladas é mostrado na Figura 11.

Figura 11: Diagramas de pressão: Alto EGR – Caso 4.

Diagrama de Pressões vs. CAD: Alta Fração EGR - Case 004



Fonte: Autor (2022).

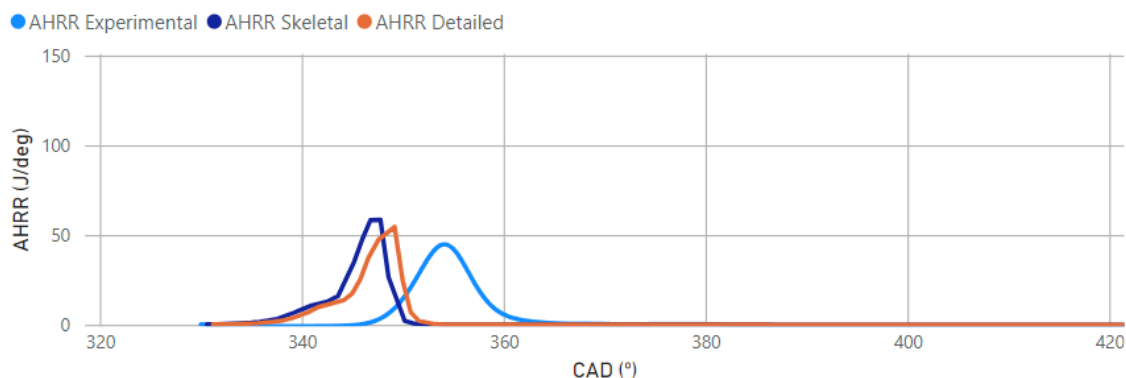
Similar ao já observado no subcapítulo anterior, o teste com temperaturas de admissões mais elevadas parece visualmente mais próximo ao realizado experimentalmente, mas ainda apresenta o início de combustão antecipado em severos graus de virabrequim. O CA1090 experimental desse caso é de 6,6°, sendo menor do que os previstos pelas combustões simuladas (7,4° e 7,5° para skeleton e detailed, respectivamente).

A Figura 12 apresenta o diagrama de AHRR para o caso atual. O primeiro discernimento acerca desse diagrama é o deslocamento presente entre os diagramas reais e simulados, causados pelo início de combustão adiantado predito pelos modelos de cinética química. Pode-se evidenciar também o aumento do intervalo de combustão (já comentado anteriormente) e a inexistência de um pico elevado de liberação de calor, apresentado em alguns casos anteriores.



Figura 12: Diagrama de AHRR: Alto EGR – Caso 4.

Diagrama de AHRR vs. CAD: Alta Fração EGR - Case 004



Fonte: Autor (2022).

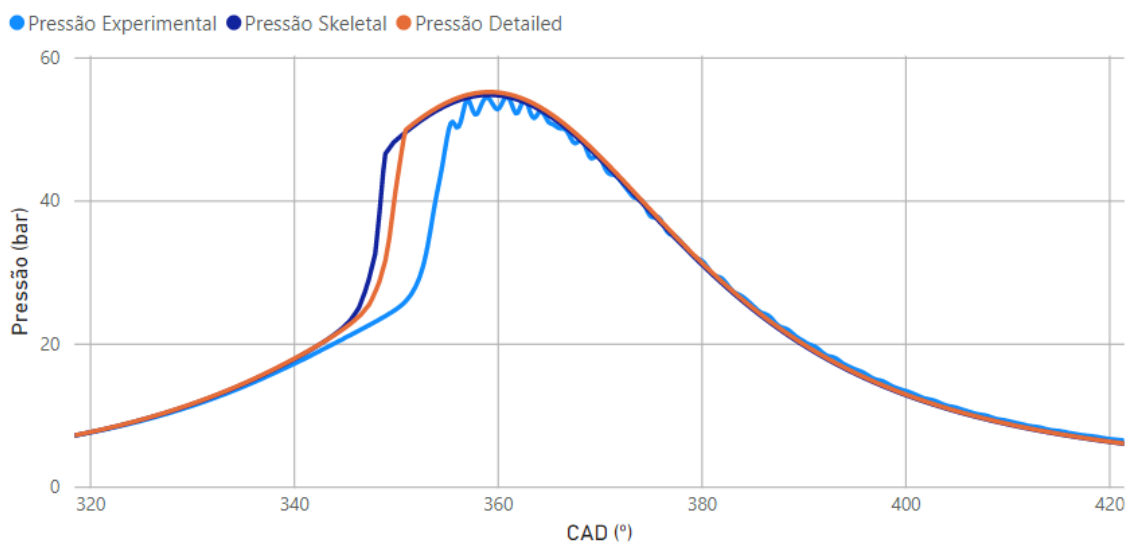
### 3.1.3 Pontos operacionais com etanol e diferentes graus de hidratação

Os últimos dois pontos experimentais realizados e escolhidos para comparação dos resultados de simulações computacionais referem-se ao desempenho dos mesmos com a utilização de etanol hidratado em diferentes concentrações. Para isso, dois testes experimentais foram realizados, diferenciando entre eles somente o combustível utilizado no cilindro HCCI, mas com as demais características de operação semelhantes. Ambos os testes foram realizados com alta carga exercida pelo cilindro HCCI, temperaturas de admissão próximo a 200°C (206 e 202°C, respectivamente para o primeiro e segundo teste desse subcapítulo) e com o TPS da entrada do plenum em 90°, ou seja, sem restrição de entrada de ar ambiente.

O primeiro ponto operacional foi realizado com etanol anidro (99,6% etanol e 0,4% de água em frações de volume) como combustível alimentador dos cilindros HCCI, e busca informar o comportamento da predição oriunda das simulações computacionais, sem interferência de moléculas de água na injeção. Dessa forma pode-se averiguar o comportamento do combustível com menores quantidades de água na injeção e alimentação do cilindro, reduzido possíveis erros dos modelos atrelados ao maior nível de hidratação do combustível utilizado. O diagrama de pressões obtidas para o caso atual é mostrado na Figura 13.

Figura 13: Diagrama de pressões: Diferentes combustíveis – Caso 5.

Diagrama de Pressões vs. CAD: Diferentes combustíveis - Case 005



Fonte: Autor (2022).

A partir da análise visual do diagrama de pressões de caso, evidencia-se inicialmente a presença de uma oscilação nos pontos de pressão máxima do cilindro, que indica a possível presença de detonação e variação local da pressão, afetando a leitura do sensor de pressão. Os dados de pressão experimental não foram submetidos a filtros suavizadores excessivos, já que poderiam tornar a curva não representativa para análise numérica posterior.

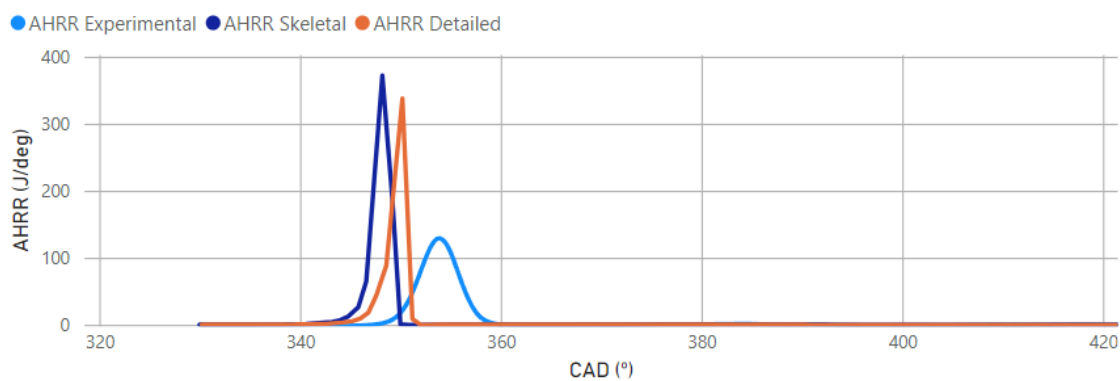
O teste experimental em questão possui CA1090 de 4,4 °, enquanto o modelo skeleton resulta em 2,5 ° e, por sua vez, o detailed apresenta uma duração de 2,9 °. Além do mais, de mesmo modo ao observado nas simulações anteriores, os modelos de cinética química falham ao prever com acurácia o ponto de início de combustão, mas retornam valores razoáveis para sua duração de combustão.

Percebe-se ao analisar a Figura 14 que, além do afastamento entre os ângulos de liberação de calor aparente entre os diagramas real e simulados, os valores máximos são muito maiores para os oriundos da emulação, com picos de três vezes o valor encontrado nos pós processamentos dos dados reais. Essa diferença já tinha sido observada no teste basal, descrito no 3.1.1, e se estende

por todos pontos experimentais observados que possuem admissão de ar ambiente para o plenum pré-admissão dos cilindros HCCI. Vale pontuar que a variação entre os valores máximos de liberação de calor é a maior encontrada dentro de todos os testes realizados, e aparenta estar em uma região de menor aproximação com os valores preditos para AHRR pelos modelos de cinética química aplicados, visto em todos testes operacionais que admitem ar ambiente diretamente no pleno e, por consequência, tem sua fração de EGR reduzida e sua duração de combustão mais rápida.

Figura 14: Diagrama de AHRR: Diferentes combustíveis – Caso 5.

Diagrama de AHRR vs. CAD: Diferentes combustíveis - Case 005

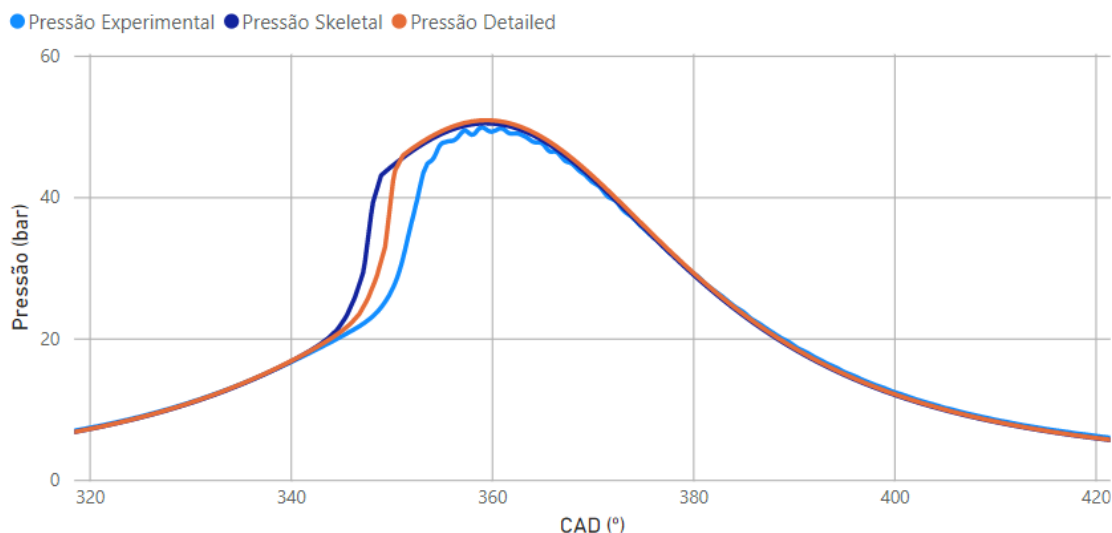


Fonte: Autor (2022).

O segundo ponto experimental desse subcapítulo, como dito anteriormente, possui as mesmas características de controle e a utilização do combustível E80W20 (etanol hidratado com 20% de água em volume), de forma a investigar a diferença encontrada quanto aos diagramas de pressão e AHRR. Ressalta-se que para a estabilização do ponto de operação e manutenção da alta carga já observada anteriormente, esse teste experimental (e por consequência os realizados através de simulação computacional) requer os maiores valores de combustível injetado por segundo entre todos os já mencionados nesse trabalho. A seguir a Figura 15 mostra o diagrama de pressão para esse segundo caso do subcapítulo (também último caso dentre os pontos trabalhados e enunciado inicialmente pelo índice 6).

Figura 15: Diagrama de pressões: Diferentes combustíveis – Caso 6.

Diagrama de Pressões vs. CAD: Diferentes combustíveis - Case 006



Fonte: Autor (2022).

Verifica-se inicialmente que a simulação desse caso utilizando E80W20 retorna pressões mais próximas ao verificado experimentalmente, especialmente ao compará-lo com o caso anterior com a utilização do E100. Todavia, deve-se levar em consideração que o ponto de início da combustão permanece muito semelhante entre os dois últimos casos, evidenciando que a alteração de combustível impacta em quantia inferior nesse parâmetro. Ainda sobre o ponto de início da combustão, vale ressaltar que a maior proximidade visual entre os diagramas de pressão desse último caso aparenta ser devido à antecipação da combustão do ciclo experimental, e em menor quantia pela adequação dos dados oriundos da simulação preditiva realizada. De qualquer modo, analisando somente as divergências entre os diagramas de pressão percebe-se que os modelos de cinética química se adaptam a injeção de água, realizada juntamente com o etanol em forma de combustível.

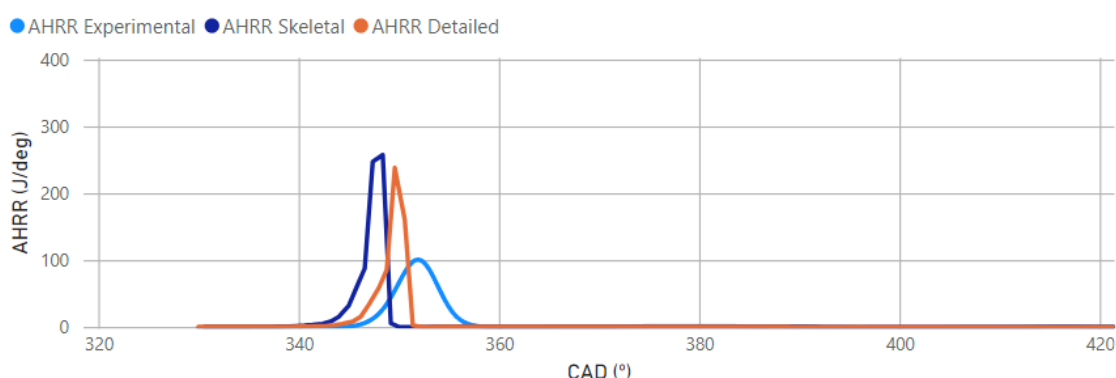
Os parâmetros de duração de combustão seguiram os padrões impostos durante a maioria dos resultados obtidos, onde a combustão oriunda de modelos de simulação se mostra mais rápida do que os evidenciados experimentalmente. O valor experimental de CA1090 é 4,4°, muito semelhante ao caso anterior com utilização de outro combustível. Tal fato pode ser explicado pela presença de água em formato de vapor, oriundo do EGR admitido junto a mistura ar-

combustível. Desse modo, observa-se uma tendência de similares durações de combustão pela utilização de combustíveis com diferentes percentuais de hidratação pela presença de vapor de água proveniente do EGR, reduzindo o impacto que a água do próprio combustível teria nas condições de operação.

A duração de combustão do mecanismo skeleton foi de  $3,2^\circ$  e o detailed, por último, possui valores de  $3,4^\circ$ . Acerca dessa diferença, pontua-se que ainda há uma diferença significativa, mas reduzida quando comparado ao teste anterior com a utilização de E100.

Figura 16: Diagrama de AHRR: Diferentes combustíveis – Caso 6.

Diagrama de AHRR vs. CAD: Diferentes combustíveis - Case 006



Fonte: Autor (2022).

Através da análise do diagrama de AHRR para o presente caso, evidenciado pela Figura 16, verifica-se a manutenção de altos valores e picos de liberação de calor pela parte oriunda das simulações frente aos dados experimentais. Todavia, quando comparados com o modelo anterior, se mostram menos acentuadas, e principalmente, com um deslocamento antecipado reduzido. De modo geral, os parâmetros de AHRR encontrados com a utilização de E80W20 mostram-se mais próximos aos verificados em testes experimentais.

### 3.2 COMPARAÇÃO NUMÉRICA DAS SIMULAÇÕES

Nessa subdivisão serão apresentados os valores de erro das pressões simuladas de cilindro quando comparadas com as obtidas experimentalmente, entre os ângulos de virabrequim de 320 a 420 CAD. Os coeficientes de determinação ( $R^2$ ) dessas análises são mostrados a seguir, na Tabela 5.

Tabela 5. Pontos de operação e coeficiente de determinação e erro relativo normalizado.

Índice	Modelo aplicado	R <sup>2</sup>	Erro relativo normalizado
1	Skeleton NUI Galway	0,83052	0,154026
	Detailed NUI Galway	0,85116	0,141998
2	Skeleton NUI Galway	0,89824	0,119307
	Detailed NUI Galway	0,91010	0,108739
3	Skeleton NUI Galway	0,90234	0,081369
	Detailed NUI Galway	0,91348	0,075495
4	Skeleton NUI Galway	0,93220	0,090024
	Detailed NUI Galway	0,94294	0,081716
5	Skeleton NUI Galway	0,90909	0,078490
	Detailed NUI Galway	0,93509	0,065487
6	Skeleton NUI Galway	0,95041	0,054548
	Detailed NUI Galway	0,97710	0,038003

A priori, os valores apresentados pelo coeficiente de determinação são elevados, mas deve-se considerar que toda faixa entre 320 CAD e o início da combustão e, posteriormente, a região após a pressão máxima e 420 CAD possuem uma maior aproximação de R<sup>2</sup> e um menor erro relativo, quando se realiza a comparação entre os modelos de predição de combustão e os experimentais. Essa região corresponde a dois terços do total de ângulos de virabrequim observados nesse trabalho, e auxilia no manutenção de elevados valores de R<sup>2</sup>, muito embora a variação seja perceptível através dos diagramas de pressão.

Os menores valores do coeficiente de determinação foram atribuídos aos dois testes basais, de índice 1 e 2, com o primeiro citado estando severamente mais impactado negativamente através dessa observação. Um dos motivos para o impacto negativo nesse parâmetro é a oscilação no sinal de pressão obtido no teste experimental (indicando início de operação com detonação), que faz com que toda zona inicial de expansão do cilindro tenha um erro (redução do coeficiente de determinação e aumento do erro relativo normalizado) atrelado quando se realiza a comparação com um diagrama sem a mesma presença. O

ponto de observação 2, por sua vez, possui uma leve correção nesse coeficiente (quando comparado com o 1) pela melhor aproximação entre os pontos de início de combustão.

Os maiores valores de erro relativo normalizado foram também encontrados nos testes basais, apresentados no subcapítulo 3.1.1, e também são negativamente impactados pela oscilação de pressão presente na aquisição dos dados. Mais além, os testes com alta fração de EGR foram impactados negativamente pois possuem pressões máximas de combustão inferiores aos demais teste, o que faz com que as diferenças entre os diagramas experimental e simulados tornem-se mais evidentes (visualmente e através de comparação numérica).

Os valores de coeficiente de determinação e erro relativo normalizado foram sempre melhores para os casos realizados com o modelo de cinética química detailed, possuindo em média um acréscimo, quando comparado com os resultados do mesmo caso do modelo skeleton, de 0,01784 para o coeficiente de determinação e uma redução de -0,01105 para o erro relativo normalizado. O teste experimental com menor diferença entre os modelos de cinética química utilizados foi o de índice 3, enquanto maior diferença encontrada entre eles pode ser evidenciada no ponto de operação de índice 6.

Por fim, vale ressaltar que entre os quatro primeiros casos apresentados (teste basal e testes com alta fração de EGR), os valores de  $R^2$  e erro relativo normalizado foram sempre melhores para os casos de maior temperatura de admissão.

### 3.3 CUSTO COMPUTACIONAL

O tempo médio necessário para convergência utilizada para os mecanismos de cinética química aplicados ao modelo do GT-Power é mostrado a seguir, na Tabela 6. Vale ressaltar que todos os casos simulados com o modelo skeleton não possuem variações de tempo requisitado superiores a 50 segundos, enquanto os casos simulados com o modelo detailed possuem no máximo 4 minutos de variação.

Tabela 6. Custo computacional médio para cada caso com mecanismo cinético.

Kinetic Mechanism	Time (hh:mm:ss)
Skeleton NUI Galway	00:02:07
Detailed NUI Galway	00:17:51

Aproximadamente 20% do custo computacional do modelo citados acima é devido ao tempo necessário para os atuadores PID (proporcionais integrativos derivativos) convergirem. Além disso, os resultados podem ser refinados ou acelerados conforme a configuração utilizada para esses atuadores e através da alteração dos parâmetros de método de convergência utilizados.

Como já comentado no subcapítulo anterior, os dados oriundos da simulação com o modelo de cinética química detalhada possuem melhor acuracidade, mas possuem um revés quando comparamos o custo computacional necessário para cada um deles, já que o modelo detalhado leva mais de 8 vezes o tempo necessário pelo modelo skeleton. Essa diferença se deve pela maior complexidade apresentada no primeiro modelo, já que necessita calcular um número maior de reações químicas e propriedades das espécies para cada ponto analisado durante a simulação dos casos.

#### **4 CONCLUSÃO**

Este trabalho propôs realizar a comparação de dois mecanismos de cinética química frente a testes experimentais realizados, utilizando combustão HCCI de etanol hidratado sem a utilização de uma fonte externa de calor, mas utilizando somente a temperatura dos gases da exaustão de um cilindro Diesel e reaproveitando seus produtos da exaustão (e a temperatura elevada) como EGR. Os modelos de cinéticas químicas escolhidos para comparação com o ciclo real foram o Skeleton NUI Galway e o Detailed NUI Galway, e a simulação ocorreu no software GT-Power, através de um modelo computacional com as mesmas características de controle das evidenciadas experimentalmente. Os pontos operacionais escolhidos e observados fazem menção e visam avaliar a acuracidade dos modelos na previsão de parâmetros referentes a utilização de ar admitido diretamente no pleno, alta fração de EGR, diferentes temperaturas



de admissão no cilindro HCCI e diferentes combustíveis, como etanol anidro, E93W07 e E80W70.

As comparações entre os resultados preditivos e o experimental ocorreram com base nos diagramas de pressão e taxa de liberação de calor aparente, mostrados e discutidos em cada subcapítulo. Além da comparação visual entre suas aproximações, a diferença e os erros encontrados entre esses diagramas foram estimadas através do coeficiente de determinação e do erro relativo normalizado.

É evidenciado, quanto a predição de parâmetros através dos modelos de cinética química utilizados, que para todos os pontos observados possuem a combustão prevista alguns graus de virabrequim adiantados quando comparados com o ciclo real. É evidenciado com os atuais dados que os motivos para esse comportamento evidenciam a inefetividade desses modelos em prever a temperatura inicial necessária para a autoignição do método de combustão HCCI, podendo ser causado por divergências no balanceamento geral de parâmetros e equações ou não se aplicando com acurácia para os pontos analisados (seja pela presença de EGR, da faixa de temperaturas de admissão ou outros parâmetros). Entretanto, com maior aparato experimental e instalação de sensores de vazão mássica de ar para o cilindro HCCI, pode-se realizar uma alteração nos parâmetros dos mecanismos, de forma a tornar a liberação aparente de calor mais próxima da observada experimentalmente.

Juntamente aos previstos inícios de combustões avançadas é evidenciado a diferença entre as durações de combustão analisadas. Nesse trabalho, o método de análise desse parâmetro é o CA1090, e é notado que os modelos de cinética química apresentem uma tendência a prever combustões mais rápidas. Os parâmetros anteriores afetam a observação visual entre os diagramas de pressões real e simuladas, mas tornam-se mais efetivos de comparação ao analisar os máximos valores de AHRR entre os mesmos casos.

Percebe-se, através da análise visual dos diagramas de pressão, que os modelos de cinética química têm melhor aproximação ao ciclo experimental para os casos de maior temperatura de admissão, em cerca de 250 °C. Com parâmetros de temperatura de admissão elevados, evidencia-se a aproximação

do intervalo de combustão e do seu início. Esse comportamento é observado para os testes basais e também para os testes com alta fração de EGR.

Os diagramas de AHRR por ângulo de virabrequim, por sua vez, mostram que as diferenças entre os testes experimentais e as simulações são menores para o grupo realizado com alta fração de EGR, motivadas, principalmente, pela evidência de maiores intervalos no tempo de combustão prevista através dos modelos preditivos de cinética química.

Já através de análise numérica oriunda do coeficiente de determinação, verifica-se que o valor de menor acuracidade é do caso de índice 1, com coeficiente de 0,8305 para o modelo Skeleton NUI Galway e 0,8516 para o modelo Detailed NUI Galway. A melhor aproximação desse valor é para o último teste apresentado, com valor de 0,9504 e 0,9771 para o modelo skeleton e detailed, respectivamente. O parâmetro de erro relativo normalizado classifica alguns ciclos de forma diferente a do coeficiente de determinação, mas segue as mesmas tendências de melhor e pior ciclo quanto suas aproximações de diagramas de pressão. O pior ciclo avaliado por esse parâmetro (caso 1) possui valores de erro elevados, de 0,1540 para o modelo skeleton e 0,1193 para o detailed, enquanto o caso 6 possui os menores valores de erro relativo normalizado, representando 0,0545 e 0,0380 para os modelos skeleton e detailed, em sua devida ordem.

Os resultados das avaliações numéricas de divergência entre os valores de pressão interna do cilindro não seguem exatamente a mesma tendência analisada visualmente. Existem três fatores que provocam essa divergência numérica entre essas comparações: oscilações no sensor de pressão, diferenças relativas de pressões e intervalo entre início de combustão e expansão a partir de 370 graus de virabrequim, onde normalmente os ciclos experimentais e simulados voltam a possuir ótimos valores de coeficientes de determinação e erros. O primeiro fator pontuado é evidenciado em todos os testes experimentais com admissão de ar ambiente ao plenum. O segundo fator que gera divergências nessas análises numéricas são as diferenças relativas entre as pressões observadas, que divergem esses coeficientes para os ciclos de menor pressão (casos com alta fração de EGR), já que tornam mais evidentes a diferença entre os diagramas com menores escalas, numericamente e também

visualmente. O último motivo de divergência numérica faz menção ao intervalo de comparação, pois percebe-se os valores de pressão analisados são muito próximos para valores até 340 e posteriores a 380 graus de virabrequim. Acontece, portanto, que quanto maior o intervalo entre o início de combustão e a pressão máxima do ciclo, maior é a tendência de divergência, visto que os demais ciclos possuem um intervalo estendido de compressão e sem combustão com valores muito próximos.

Quanto a predição obtida pelos modelos, vale ressaltar que o modelo Detailed NUI Galway tem maior acerto quanto a esses parâmetros para todos os casos avaliados, seja visual ou numericamente. As variações médias entre os casos detailed e skeleton são de 0,01785 para o coeficiente de determinação e -0,0110 para o erro relativo normalizado.

As diferenças em custo computacional são também altas entre os modelos de cinética química, já que o Detailed NUI Galway requer em média 8 vezes o tempo de processamento necessário pelo modelo Skeleton NUI Galway. Somando essa análise às conclusões anteriores, recomenda-se a utilização do modelo skeleton para aplicações pontuais, enquanto o modelo detailed se justifica em casos de validação de modelos e processamentos finais, onde uma maior confiabilidade é necessária. Entretanto, vale ressaltar que o avanço na tecnologia suporta a utilização de modelos detalhados, já que o desempenho e capacidade de processamento de computadores atuais reduz o tempo total necessário.

## **5 CONSIDERAÇÕES FINAIS**

### **5.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS**

Em sugestões para trabalhos futuros, recomenda-se uma maior implementação de sensores de temperatura e fluxo mássico de ar, já que existem muitos fatores que podem impactar na combustão prevista pelo modelo computacional. Uma possibilidade ainda melhor seria avaliar o comportamento dos modelos de cinética química aplicados a uma configuração semelhante, mas com um motor de somente dois cilindros. Desse modo, tem-se a garantia de que a mistura ar-combustível admitida pelo cilindro faz menção às mesmas condições encontradas no plenum e duto de admissão.

Outro ponto de recomendação é a realização de testes com temperaturas de admissão diferentes, podendo ser realizado, principalmente através de um diferente método de aplicação de carga ao conjunto motor-gerador e do controle mássico de injeção de diesel no cilindro alimentador.

## REFERÊNCIAS

- BARBOSA JUNIOR, Carlos Eduardo. **Modelagem unidimensional e simulação de um motor com ignição por centelha**. 2009. Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009.
- BHAGATWALA, A et al. **Direct numerical simulations of HCCI/SACI with ethanol**. *Combustion and Flame*. [s. l.], v. 161, n. 7, p. 1826–1841, 2014.
- BENDU, H et al. **Homogeneous charge compression ignition (HCCI) combustion: Mixture preparation and control strategies in diesel engines**. *Renew. Sustain. Energy Rev*38, 732-746, 2014. doi: 10.1016/j.rser.2014.07.019.
- CALAM, A.; AYDOGAN, B.; HALIS, S. **The comparison of combustion, engine performance and emission characteristics of ethanol, methanol, fusel oil, butanol, isopropanol and naphtha with n-heptane blends on HCCI engine**. *Fuel*, v. 266, 2020.
- CINAR, C. et al. **Effects of intake air temperature on combustion, performance and emission characteristics of a HCCI engine fueled with the blends of 20% n-heptane and 80% isooctane fuels**. *Fuel Processing Technology*, v. 130, n. C, p. 275–281, 2015.
- ÇELEBI, S., KOCAKULAK, T., DEMIR, U., ERGEN, G., YILMAZ, E. **Optimizing the effect of a mixture of light naphtha, diesel and gasoline fuels on engine performance and emission values on an HCCI engine**. *Applied Energy*, 2023.
- CORREIA, E. R. **Computational studies on HCCI engines**. Cranfield University, 2010.
- CURRAN H., Z. SERINYEL, W. METCALFE, **Combustion Chemistry Centre at NUI Galway**, Ireland, Personal Communication, 2010.
- DE BELLIS, V., MALFI, E., LANOTTE, A., FASULO, G. et al., **A Multi-Zone Combustion Model Integrated with a Fast Tabulated Chemical Kinetics Applied for the Simulation of HCCI Engines Supplied with Hydrogen or Carbon-Based Fuels**, SAE Technical Paper 2022-01-0388, 2022.
- EDLER, F., GEIER, B., REITER, W., RIEGER, J., SPIJKER, C., & RAUPENSTRAUCH, H. **Development of an atmosphere particle kinetic model for particle reactions in a combustion Flash-Reactor using CFD-methods**. 2017. *Energy Procedia*, 120, 540–547.
- FAGUNDEZ, J. L. S., SARI, R. L., GARCIA, A., PEREIRA, F. M., MARTINS, M. E. S., & SALAU, N. P. G. **A chemical kinetics-based investigation on laminar burning velocity and knock occurrence in a spark-ignition engine fueled with ethanol–water blends**. *Fuel*, 280, 2020.
- FEROSKHAN, M.; THANGAVEL, V.; SUBRAMANIAN, SANKARALINGAM, R. K; ISMAIL, S; **Effects of operating parameters on the performance, emission and combustion indices of a biogas fuelled HCCI engine**, *Fuel*, 298, 2021.
- GOLKE, D., SILVEIRA, J., LANZANOVA, T., MARTINS, M., **G Index: A Novel Knock Detection Method that is Simpler and Calibration-Free, Based on**

**Angular Position of Combustion Parameters**, SAE Technical Paper 2022-01-0479, 2022.

HEALY D., N.S. DONATO, C.J. AUL, E.J. PETERSEN, H.J. BOURQUE, H.J. CURRAN, **Combust. Flame** **157** (2010) 1526–1539.

HUNICZ, J., MIKULSKI, M., GECA, M. S., & RYBAK, A. **An applicable approach to mitigate pressure rise rate in an HCCI engine with negative valve overlap**. *Applied Energy*, 257, 114018, 2020.

LU T., **Department of Mechanical Engineering University of Connecticut**, 2014, Online. Available: <http://www.engr.uconn.edu/~tlu/mechs/mechs.htm>.

MARTINS, M. et al. (2017). **HCCI of Wet Ethanol on a Dedicated Cylinder of a Diesel Engine**. SAE Technical Papers. doi: 10.4271/2017-01-0733.

MARTINS, M. E. S. et al. (2018); **HCCI de etanol hidratado em um cilindro dedicado de um motor diesel usando recirculação dos gases da exaustão**, SAE Technical Papers, doi: 10.5151/simea2018-PAP88.

MAURYA, R. K.; AGARWAL, A. K.; **Experimental study of combustion and emission characteristics of ethanol fuelled port injected homogeneous charge compression ignition (HCCI) combustion engine**; *Applied Energy*, v.88, p. 1169-1180, 2011.

OALEKAN, W. (2011). **An Experimental Study of Different Effects of EGR Rates on The Performance and Exhaust Emissions of The Stratified Charge Piston Direct Injection Compressed Natural Gas Engine**. *Journal of Applied Sciences*. doi: 10.3923/jas.2011.1479.1490.

PERIN, Augusto Trintinaglia. **Avaliação do desempenho e emissões de um motor de ignição de carga homogênea por compressão operando com etanol e catalisador de três vias**. Orientador: Mario Eduardo Santos Martins. 2018. Monografia (Graduação) – Curso de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, 2018.

SALIH, S. and DELVESCOVO, D., **Design and Validation of a GT Power Model of the CFR Engine towards the Development of a Boosted Octane Number**, SAE Technical Paper 2018-01-0214, 2018.

SARI, R. L. **Avaliação da utilização de etanol com elevados teores de água em motores de combustão interna com ignição por centelha**. Orientador: Fernando Marcelo Pereira. Dissertação (Mestrado) – Curso de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2017.

SHARMA, T. K.; RAO, G. A. P.; MURTHY, K. M. **Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Engines: A Review**. *Archives of Computational Methods in Engineering*, v. 11, n. 6, p. 47–67, 2015.

TANIGUCHI, M., KOZUMA T., TAKASHIMA Y., TSUMURA T. **Development of a Coal Combustion Model Compliant with the CHEMKIN Format for Use in Co-Firing Analysis with Hydrogen and Low-Carbon Fuels**. *Energy & Fuels*, 2022 37 (1), 657-666.

TELLI G.D., G.Y. ZULIAN, T.D.M. LANZANOVA, M.E.S. MARTINS, L.A.O. ROCHA. **An experimental study of performance, combustion and emissions characteristics of an ethanol HCCI engine using water injection**. *Applied Thermal Engineering*, v. 204. 2022.

TURN, S. R. **An introduction to Combustion Concepts and Applications**. 3rd. ed. New York: McGraw-Hill, 2012.

WANG, X.; GAO, J.; CHEN, Z.; ZHAO, Y.; HUANG, Y.; CHEN, Z. **Evaluation of hydrous ethanol as a fuel for internal combustion engines: A review**. *Renew. Energ.*, v. 194, p. 504-525, 2022.

WILLIAM, J. P. and Charles, K. W. 2011. **Combustion Chemistry**. California, United States: Lawrence Livermore National Laboratory, 2011.

ZHAO, H. **HCCI and CAI engines for the automotive industry**. 1st. ed. Cambridge: Woodhead Publishing Limited and CRC Press LLC, 2007.