ANÁLISE TERMODINÂMICA DE MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA DE TIPO ALTERNATIVO USANDO UM MODELO QUASI-DIMENSIONAL

Daniel da Silva Tonon, Ezio Castejon Garcia Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA) – Divisão de Engenharia Mecânica

E-mails: ds.tonon@gmail.com, ezio@ita.br

RESUMO

O uso de simulações para a predição do comportamento de determinados mecanismos está cada vez mais difundido na indústria automobilística, uma vez que ensaios experimentais possuem um custo muito mais elevado. Dentre todos os mecanismos que compõem um automóvel o motor merece um destaque especial, já que este é responsável pela geração de potência e é através dele que o veículo iniciará o seu movimento. Com o passar do tempo o projeto desse mecanismo precisou evoluir consideravelmente se comparado com os primeiros automóveis fabricados na história, devido as exigências de âmbito social e ecológico. Dessa forma, é de fundamental importância que as montadoras avaliem o comportamento do motor em toda a sua faixa de operação, e essa avaliação pode ser feita através de diferentes modelos numéricos. Atualmente os modelos mais difundidos para a simulação desses mecanismos são modelos *Single-Zone*, *Multi-Zone* e *Multi-Dimensional*. O presente trabalho faz uma análise comparativa entre dados experimentais e resultados obtidos através de simulações de motores de combustão interna, utilizando um modelo *Multi-Zone* de tipo *Quasi-Dimensional*. O modelo apresentado nesse trabalho ainda está em fase de desenvolvimento, porém já demonstra um grande potencial nas análises de desempenho.

1. NOMENCLATURA

T_u : temperatura dos gases não queimados h_{in} : entalpia da massa entrando T_b : temperatura dos gases queimados h_{in} : entalpia da massa saindo T_{ref} : temperatura de referência (297 K) h_u : entalpia da massa não queimada T_{wall} : temperatura da parede h_b : entalpia da massa não queimada T_{wall} : temperatura após a admissão V : volume total m_{in} : massa entrando V_u : volume não queimado m_{ex} : massa saindo V_b : volume queimado m_ex : massa não queimada V_r : pressão após a admissão m_u : massa não queimada V_r : pressão após a admissão m_b : massa queimada V_r : pressão após a admissão c_p : calor específico a pressão constante p : pressão de referência (1 atm) c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_m : pressão em vazio c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_u : densidade Q_u : calor transferido p_u : densidade da massa não queimada	<i>T</i> : temperatura	Q_b : calor transferido pela massa queimada
T_b : temperatura dos gases queimados h_{ex} : entalpia da massa saindo T_{ref} : temperatura da parede h_{u} : entalpia da massa não queimada T_{wall} : temperatura da parede h_{b} : entalpia da massa não queimada T_{vall} : temperatura após a admissão V : volume total m_{in} : massa entrando V_{u} : volume não queimado m_{ex} : massa saindo V_{u} : volume queimado m_{ex} : massa saindo V_{u} : volume queimado m_{ex} : massa queimada V_{i} : volume queimado m_{ex} : calor específico a pressão constante p : pressão c_{pu} : calor específico a pressão constante da massa não queimada p_{ref} : pressão de referência (1 atm) p_{rb} : calor específico a pressão constante da massa queimada p_{rcf} : pressão em vazio Q_{u} : calor transferido p_{u} : densidade Q_{u} : calor transferido pela massa não queimada ρ_{b} : densidade da massa queimada	T_u : temperatura dos gases não queimados	h_{in} : entalpia da massa entrando
$T_{ref.}$ temperatura de referência (297 K) h_u : entalpia da massa não queimada T_{wall} : temperatura da parede h_b : entalpia da massa não queimada T_{wall} : temperatura após a admissão h_b : entalpia da massa queimada T_r : temperatura após a admissão V : volume total m_{in} : massa entrando V_u : volume não queimado m_{ex} : massa saindo V_b : volume queimado m_{ex} : massa queimada V_b : volume queimado m_u : massa não queimada V_c : pressão após a admissão m_b : massa queimada V_c : volume varrido c_p : calor específico a pressão constante da massa não queimada p_ref : pressão de referência (1 atm) p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da massa queimada p_m : pressão em vazio Q_c : calor transferido ρ_b : densidade da massa não queimada	T_b : temperatura dos gases queimados	h_{ex} : entalpia da massa saindo
T_{wall} : temperatura da parede h_b : entalpia da massa queimada T_r : temperatura após a admissão V : volume total m_{in} : massa entrando V_i : volume não queimado m_{ex} : massa saindo V_b : volume queimado m_{ex} : massa não queimada V_r : pressão após a admissão m_u : massa não queimada V_r : pressão após a admissão m_b : massa queimada V_{di} : volume varrido c_p : calor específico a pressão constante p : pressão de referência (1 atm) $massa não queimada$ p_r : pressão após a admissão c_{pu} : calor específico a pressão constante da massa não queimada p_{ref} : pressão de referência (1 atm) c_{pb} : calor específico a pressão constante da massa queimada p_m : pressão em vazio Q : calor transferido ρ_u : densidade Q_u : calor transferido pela massa não queimada ρ_b : densidade da massa queimada	<i>T_{ref}</i> : temperatura de referência (297 K)	h_u : entalpia da massa não queimada
T_r : temperatura após a admissão V : volume total m_{in} : massa entrando V_u : volume não queimado m_{ex} : massa saindo V_u : volume queimado m_{ex} : massa saindo V_b : volume queimado m_{ex} : massa não queimada V_r : pressão após a admissão m_b : massa queimada V_d : volume varrido c_p : calor específico a pressão constante p : pressão c_{pu} : calor específico a pressão constante da p_{ref} : pressão de referência (1 atm) $massa não queimada$ p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_m : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor transferido ρ_u : densidade Q : calor transferido pela massa não queimada ρ_b : densidade da massa queimada	T_{wall} : temperatura da parede	h_b : entalpia da massa queimada
m_{in} : massa entrando V_u : volume não queimado m_{ex} : massa saindo V_u : volume queimado m_{ex} : massa saindo V_b : volume queimado m_u : massa não queimada V_r : pressão após a admissão m_b : massa queimada V_d : volume varrido c_p : calor específico a pressão constante p : pressão c_{pu} : calor específico a pressão constante da p_{ref} : pressão de referência (1 atm)massa não queimada p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_r : densidade Q : calor transferido ρ_u : densidade da massa não queimada Q_u : calor transferido pela massa não queimada ρ_b : densidade da massa queimada	<i>T_r</i> : temperatura após a admissão	<i>V</i> : volume total
m_{ex} : massa saindo V_b : volume queimado m_u : massa não queimada V_r : pressão após a admissão m_b : massa queimada V_r : pressão após a admissão c_p : calor específico a pressão constante p : pressão c_{pu} : calor específico a pressão constante da p_{ref} : pressão de referência (1 atm)massa não queimada p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_ref : pressão de referência (1 atm)massa não queimada p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_m : pressão após a admissão p_b : calor transferido ρ_u : densidade Q_u : calor transferido pela massa não queimada ρ_b : densidade da massa queimada	m_{in} : massa entrando	<i>V_u</i> : volume não queimado
m_u : massa não queimada V_r : pressão após a admissão m_b : massa queimada V_d : volume varrido m_b : calor específico a pressão constante p : pressão c_{pu} : calor específico a pressão constante da p_{ref} : pressão de referência (1 atm)massa não queimada p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_m : pressão em vazio p_{c} : calor transferido ρ_u : densidade Q_u : calor transferido pela massa não queimada ρ_b : densidade da massa queimada	m_{ex} : massa saindo	V_b : volume queimado
m_b : massa queimada V_{dt} : volume varrido c_p : calor específico a pressão constante p : pressão c_{pu} : calor específico a pressão constante da p_{ref} : pressão de referência (1 atm)massa não queimada p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_m : pressão em vazio $massa queimada$ ρ_u : densidade Q : calor transferido ρ_u : densidade da massa não queimada Q_u : calor transferido pela massa não queimada ρ_b : densidade da massa queimada	<i>m</i> _{<i>u</i>} : massa não queimada	Vr: pressão após a admissão
c_p : calor específico a pressão constante p : pressão c_{pu} : calor específico a pressão constante da p_{ref} : pressão de referência (1 atm)massa não queimada p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da p_m : pressão em vaziomassa queimada ρ_u : densidade Q : calor transferido ρ_u : densidade da massa não queimada Q_u : calor transferido pela massa não queimada ρ_b : densidade da massa queimada	m_b : massa queimada	V_{dt} : volume varrido
c_{pu} : calor específico a pressão constante da massa não queimada p_{ref} : pressão de referência (1 atm) p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da massa queimada p_r : pressão em vazio ρ : densidade Q : calor transferido ρ_u : densidade da massa não queimada Q_u : calor transferido pela massa não queimada ρ_b : densidade da massa queimada	c_p : calor específico a pressão constante	<i>p</i> : pressão
massa não queimada p_r : pressão após a admissão c_{pb} : calor específico a pressão constante da massa queimada p_m : pressão em vazio ρ : densidade Q : calor transferido ρ_u : densidade da massa não queimada Q_u : calor transferido pela massa não queimada ρ_b : densidade da massa queimada	c_{pu} : calor específico a pressão constante da	<i>p_{ref}</i> :pressão de referência (1 atm)
c_{pb} : calor específico a pressão constante da massa queimada p_m : pressão em vazio ρ : densidade Q : calor transferido ρ_u : densidade da massa não queimada Q_u : calor transferido pela massa não queimada ρ_b : densidade da massa não queimada	massa não queimada	<i>p_r</i> : pressão após a admissão
massa queimada ρ : densidade Q : calor transferido ρ_u : densidade da massa não queimada Q_u : calor transferido pela massa não queimada ρ_b : densidade da massa queimada	c_{pb} : calor específico a pressão constante da	p_m : pressão em vazio
<i>Q</i> : calor transferido ρ_u : densidade da massa não queimada Q_u : calor transferido pela massa não queimada ρ_b : densidade da massa queimada	massa queimada	ρ : densidade
Q_u : calor transferido pela massa não queimada $ ho_b$: densidade da massa queimada	<i>Q</i> : calor transferido	ρ_u : densidade da massa não queimada
	Q_u : calor transferido pela massa não queimada	ρ_b : densidade da massa queimada

- *R_u*: constante independente do gás para a massa não queimada
- *R_b*: constante independente do gás para a massa queimada
- *S*_{*L*}: velocidade de propagação de frente de chama laminar
- $S_{L,0}$: velocidade de propagação de frente de chama laminar de referência
- S_{T} : velocidade de propagação de frente de chama turbulenta
- f: fator fenomenológico
- *x_b*: fração de massa queimada
- rot: velocidade em rotações por minuto
- y_r: fração de massa queimada residual
- α : coeficiente exponencial
- β : coeficiente exponencial
- ϕ : razão de equivalência

- ϕ_m : parâmetro de razão de equivalência para $S_{L,0}$ máximo
- B_m : parâmetro para cálculo de $S_{L,0}$
- B_{ϕ} : parâmetro para cálculo de $S_{L,0}$
- n: número de mols de uma dada espécie
- N: número de mols totais
- *a*_s: número de mols de ar para combustão estequiométrica
- y: fração molar
- *K*: constante de equilíbrio
- h_{wos} : coeficiente de transferência de calor
- *u*: velocidade característica
- k: coeficiente politrópico
- D: diâmetro do cilindro
- v_p : velocidade média do pistão
- : representação da taxa de uma propriedade ou variável com o tempo

2. INTRODUÇÃO

A simulação de motores de combustão interna, atualmente, é feita através de três tipos de modelos, sendo eles: *Single-Zone*, *Multi-Zone* e *Multi-Dimensional*. Com relação ao primeiro, a câmara de combustão é analisada como uma única região, de forma que todas as propriedades são homogêneas. Os modelos do segundo tipo, *Multi-Zone*, dividem a câmara de combustão em várias regiões, que podem ter propriedades distintas umas das outras, por exemplo, pode haver diferença de temperatura entre uma região e outra. Por fim, os modelos *Multi-Dimensional* também dividem a análise em várias seções, porém essas possuem mais de uma dimensão física.

A motivação inicial é desenvolver um código próprio e simplificado, capaz de analisar o comportamento de motores de combustão interna de ciclo Otto, porém deseja-se que no futuro esse código seja atualizado, de forma a conseguir estimar parâmetros de desempenho, consumo e emissões. Dessa forma, optou-se por utilizar um modelo de tipo *Multi-Zone*, já que este permite analisar efeitos de estratificação de temperatura e espécies químicas, o que possibilitará uma melhor estimativa de parâmetros como a duração da combustão, a evolução da pressão durante a combustão, e as emissões[1].

O equacionamento utilizado para a construção do código é descrito por Curto[1], que propõe um modelo *Multi-Zone* de tipo *Quasi-Dimensional* para a análise desses mecanismos.

É importante ressaltar que o modelo proposto neste trabalho ainda está em fase de desenvolvimento, e todas as análises relatadas neste texto são de cunho qualitativo, e não quantitativo, de forma que o objetivo principal é conseguir reproduzir o comportamento dos dados utilizados.

3. MAIS DO QUE UMA QUESTÃO DE NOMENCLATURA

O ciclo motor é composto de 6 eventos: admissão, compressão, combustão, expansão motora, *blowdown* e exaustão. Na língua inglesa a classificação dos motores de combustão interna é

feita através do número de vezes que o pistão percorre a distância entre o Ponto Morto Inferior (PMI) e o Ponto Morto Superior (PMS), até que todos esses eventos sejam realizados. Dessa forma, os motores podem ser de dois tipos: 2 *stroke* e 4 *stroke* (*stroke* é a palavra utilizada na língua inglesa para definir a distância entre o PMI e o PMS).

Essa mesma classificação no Brasil é feita utilizando a palavra "tempos" (motores de 2 ou 4 "tempos"), porém, na língua portuguesa, a distância entre o PMI e o PMS é definida como curso. Neste trabalho faz-se uma substituição da palavra "tempos" para "cursos", de forma a classificar os motores de combustão interna como sendo de 2 ou 4 cursos.

4. MODELOS MULTI-ZONE

Antes de se analisar um modelo *Multi-Zone*, deve-se entender como trabalham os modelos *Single-Zone* nas simulações de motores de combustão interna.

Modelos *Single-Zone* são modelos numéricos onde a única variável independente é o tempo [1]. Dessa forma esses modelos consideram que a composição e as propriedades termodinâmicas, como temperatura e pressão, são espacialmente uniforme, e variarão apenas pela influência do tempo [2]. Esses tipos de modelos geralmente utilizam uma relação empírica para determinar a taxa de consumo de combustível, ou funções analíticas, como, por exemplo, a curva de Wiebe [3].

No caso dos modelos *Multi-Zone*, a câmara de combustão é dividida em várias regiões. Cada uma dessas regiões poderá trocar calor e massa com as regiões adjacentes, seja essa uma outra região da câmara de combustão ou a parede do cilindro. A temperatura de cada uma dessas regiões é distinta e homogênea dentro daquela região, e naturalmente a pressão para todas as regiões é igual. Figura 1 mostra um exemplo de divisão da câmara de combustão em um modelo *Multi-Zone*.





Fonte: Hradec (2012) [4].

A grande vantagem desses modelos em relação aos modelos *Single-Zone* é o fato de se poder verificar fenômenos mais complexos, como a estratificação de temperatura, ou de espécies dentro da câmara de combustão, e esses tipos de informação são importantes para estimar a duração da combustão, e a taxa de aumento da pressão com o andamento do ciclo.

No caso desse texto, porém, utiliza-se um caso particular dos modelos *Multi-Zone*, que são os modelos *Quasi-Dimensional*. Estes dividem a câmara de combustão em apenas duas regiões,

e apenas durante o evento de combustão [1]. Assume-se que durante a combustão a chama se propagará como uma calota esférica, preenchendo o volume da câmara de combustão até que não exista mais espécies a serem oxidadas na câmara. A forma de se determinar a evolução dessa calota esférica pode ser feita utilizando equações analíticas, como a curva de Wiebe, ou com o auxílio de um submodelo que determine a velocidade de propagação de frente de chama [3]. O modelo proposto nesse trabalho utiliza um submodelo para o cálculo da velocidade de propagação de frente de chama, que será discutido em outra parte do texto.

Outros tipos de modelo que podem ser citados como alternativa para a simulação de Motores de Combustão Interna, são os modelos *Multi-Dimensional*, que estão fortemente associados a análises CFD, porém estes não são muito utilizados para a determinação de parâmetros como torque e potência, pois exigem um tempo de cálculo muito mais elevado que os modelos anteriormente descritos [1, 5]. Essas análises são mais utilizadas em casos específicos, como a determinação da temperatura da sede da válvula de exaustão, por exemplo.

4.1. Equacionamento

O desenvolvimento do equacionamento não será demonstrado nesse documento, mas pode ser encontrado em [1]. Aqui apenas serão mostradas as principais equações utilizadas para a obtenção da Temperatura e Pressão dentro da câmara de combustão.

A taxa de variação da temperatura com o tempo, é obtida através da seguinte equação:

$$\dot{T} = \frac{1}{\left(m_u \cdot c_{p,u} + m_b \cdot c_{p,b}\right)} \cdot \left[\dot{Q}_u + \dot{Q}_b + \dot{m}_{in} \cdot h_{in} - \dot{m}_u \cdot h_u + \dot{m}_{ex} \cdot h_{ex} - \dot{m}_b \cdot h_b + V \cdot \dot{p}\right]$$
(1)

Para a taxa de variação da pressão com o tempo:

$$\dot{p} = \left[p \cdot \left(\frac{\dot{m}_u}{\rho_u} + \frac{\dot{m}_b}{\rho_b} - \dot{V} \right) + \zeta \cdot \left(\dot{Q}_u + \dot{Q}_b + \dot{m}_{in} \cdot h_{in} - \dot{m}_u \cdot h_u + \dot{m}_{ex} \cdot h_{ex} - \dot{m}_b \cdot h_b \right) \right] \cdot \frac{1}{\left[V \cdot \left(1 - \zeta \right) \right]}$$
(2)

Sendo que:

$$\zeta = \frac{V}{\frac{V_u \cdot c_{p,u}}{R_u} + \frac{V_b \cdot c_{p,b}}{R_b}}$$
(3)

Evidentemente nem todos os eventos do ciclo motor necessitarão de todos esses parâmetros presentes nas equações (1), (2) e (3). Note que, durante o evento de admissão a válvula de exaustão estará fechada, e dessa forma não haverá massa saindo do volume de controle, e portanto esse termo será igual a zero. Além disso, ainda durante a admissão, a taxa de massa entrando no volume de controle será igual à taxa de massa não queimada no volume de controle. O mesmo tipo de raciocínio pode ser estendido para o evento de exaustão. Note também que durante a compressão e a expansão motora, a câmara de combustão será um sistema fechado, de forma que todos os termos referentes as entradas e saídas de massa serão iguais a zero.

4.2. Submodelo de Combustão

Para esse submodelo assume-se que assim que a vela é acionada a combustão se inicia no ponto onde a centelha é gerada, e assim a frente de chama se propagará por toda a câmara de combustão com o formato de uma calota esférica. Figura 2 representa esse tipo de comportamento.

Figura 2: Representação da propagação da chama pela câmara de combustão.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Assim como mostrado na Figura 2, a chama se propaga com uma intensidade igual à velocidade de propagação de frente de chama turbulenta, referente ao combustível e às condições termodinâmicas dentro da câmara de combustão, para cada instante.

A seguinte correlação [1], propõem o cálculo da velocidade de propagação de frente de chama turbulenta de uma forma proporcional à velocidade de propagação de frente de chama laminar:

$$S_{T} = f \cdot S_{L} \cdot \frac{\frac{\rho_{u}}{\rho_{b}}}{\left(\frac{\rho_{u}}{\rho_{b}} - 1\right) \cdot x_{b} + 1}$$

$$\tag{4}$$

O fator fenomenológico, f [1], presente na equação (4), é calculado da seguinte forma:

$$f=1+0,0018 \cdot rot$$
 (5)

Para o cálculo da velocidade de propagação de chama laminar, utiliza-se a correlação de Kerk, descrita em Heywood [3]:

$$S_{L} = S_{L,0} \cdot \left(\frac{T_{u}}{T_{ref}}\right)^{\alpha} \cdot \left(\frac{p}{p_{ref}}\right)^{\beta} \cdot \left(1 - 2,06 \cdot y_{r}^{0,77}\right)$$
(6)

Os coeficientes α , β e $S_{L,0}$, são obtidos da seguinte forma:

$$\alpha = 2,18 - 0,8 \cdot (\phi - 1) \tag{7}$$

$$\beta = -0.16 + 0.22 \cdot (\phi - 1) \tag{8}$$

$$S_{L,0} = B_m + B_\phi \cdot \left(\phi - \phi_m\right)^2 \tag{9}$$

Os valores de ϕ_m , B_m e B_{ϕ} , são referentes ao combustível, que no caso desse trabalho foi considerado o isoctano. Esses valores podem ser encontrados em [3].

Note que as equações apresentadas não são capazes de considerar alguns fatores importantes e que exercerão forte influência na propagação da chama na câmara de combustão, como por exemplo a modificação do raio referente a frente de chama, devido a compressão ou expansão com o movimento do pistão, e os efeitos que a parede da câmara de combustão exercerá quando a frente de chama encontra esse obstáculo. Dessa forma inseriu-se no modelo um fator de correção *F* multiplicando a equação (4), de forma a ajustar o modelo. Esse fator foi inserido devido a limitação do código em prever o instante exato de início de liberação de energia [3], além dos efeitos de turbulência e influência das paredes [1], na combustão. Esse fator é dado da seguinte forma:

$$F = sen\left(\frac{0,5\cdot\pi}{3} + \frac{\pi}{3}\cdot\frac{x_b}{0,25}\right) \rightarrow 0 < x_b < 0.25$$

$$F = 1 \rightarrow 0.25 < x_b < 0.65$$

$$F = sen\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{3}\cdot\left(\frac{(x_b - 0.65)}{0.35}\right)\right) \rightarrow 0.65 < x_b < 1$$

$$(10)$$

4.3. Reações Químicas

Durante a combustão a mistura de ar mais combustível passará por um processo de oxidação, de forma que essa mistura será convertida em outras espécies, que serão chamadas de produtos de combustão. O número de espécies e de reações intermediárias durante esse processo pode ser gigantesco, se tornando inviável para as análises propostas pelo modelo apresentado.

Dessa forma, adota-se um modelo de reações químicas mais simples, porém suficiente para as análises desejadas. Esse modelo é descrido em Ferguson [6], e

considera a seguinte reação global, para um dado combustível $C_{\alpha}H_{\beta}O_{\gamma}N_{\delta}$, com proporção estequiométrica a_s , e relação de equivalência ϕ :

$$C_{\alpha}H_{\beta}O_{\gamma}N_{\delta} + \frac{a_{s}}{\phi} \cdot (O_{2} + 3,76N_{2}) \rightarrow n_{1} \cdot CO_{2} + n_{2} \cdot H_{2}O + n_{3} \cdot N_{2} + n_{4} \cdot O_{2} + n_{5} \cdot CO +$$
(11)
$$n_{6} \cdot H_{2} + n_{7} \cdot H + n_{8} \cdot O + n_{9} \cdot O + n_{9} \cdot OH + n_{10} \cdot NO$$

Deve-se, portanto, encontrar o número de mols de cada espécie dos produtos de combustão. Através do balanço químico dos componentes, tem-se:

$$C: \alpha = (y_1 + y_5) \cdot N \tag{12}$$

$$H: \beta = (2 \cdot y_2 + 2 \cdot y_6 + y_7 + y_9) \cdot N$$
(13)

$$O: \quad \gamma + \frac{2 \cdot a_s}{\phi} = \left(2 \cdot y_1 + y_2 + 2 \cdot y_4 + y_5 + y_8 + y_9 + y_{10}\right) \cdot N \tag{14}$$

$$N: \ \delta + \frac{3.76 \cdot a_s}{\phi} = \left(2 \cdot y_3 + y_{10}\right) \cdot N \tag{15}$$

Sabe-se também que: $\begin{pmatrix} 10 \\ 10 \end{pmatrix}$

$$\left(\sum_{i=1}^{10} y_i\right) - 1 = 0 \tag{16}$$

Contudo, nota-se que existem 11 incógnitas (as frações molares de cada componente e mais o número de mols total), e apenas 5 equações. As outras seis equações são dadas das constantes de equilíbrio de algumas reações, sendo elas:

$$\frac{1}{2} \cdot H_2 \Leftrightarrow H \qquad K_1 = \frac{y_7 \cdot p^{0,5}}{y_6^{0,5}}$$
(17)

$$\frac{1}{2} \cdot O_2 \Leftrightarrow O \qquad K_2 = \frac{y_8 \cdot p^{0,5}}{y_4^{0,5}}$$
(18)

$$\frac{1}{2} \cdot O_2 + \frac{1}{2} \cdot H_2 \Leftrightarrow OH \qquad K_3 = \frac{y_9}{y_4^{0.5} \cdot y_6^{0.5}}$$
(19)

$$\frac{1}{2} \cdot O_2 + \frac{1}{2} \cdot N_2 \Leftrightarrow NO \qquad K_4 = \frac{y_{10}}{y_4^{0.5} \cdot y_3^{0.5}}$$
(20)

$$\frac{1}{2} \cdot O_2 + H_2 \Leftrightarrow H_2 O \qquad \qquad K_5 = \frac{y_2}{y_4^{0,5} \cdot y_6 \cdot p^{0,5}}$$
(21)

$$\frac{1}{2} \cdot O_2 + CO \Leftrightarrow CO_2 \qquad K_6 = \frac{y_1}{y_4^{0.5} \cdot y_5 \cdot p^{0.5}}$$
(22)

O valor de cada uma dessas constantes é obtido através da seguinte correlação:

$$\log_{10} K_i(T) = A_i \cdot \ln\left(\frac{T}{1000}\right) + \frac{B_i}{T} + C_i + D_i \cdot T + E_i \cdot T^2$$
(23)

Os valores de A_i , B_i , C_i , D_i e E_i para cada uma das constantes, é fornecido em [6].

4.4. Trocas térmicas

De maneira geral para a estimativa das trocas de calor, dois modelos são mais difundidos, sendo eles os modelos propostos por Annand (1970-1971) [7] e Woschni (1967) [8].

O primeiro tenta caracterizar as trocas de calor de maneira geral, ou seja, incluindo todos os mecanismos de troca de calor durante o ciclo. O segundo modelo (Woschni), que também é muito utilizado, diferentemente do modelo anterior, não considera as perdas por radiação como parte da equação, mas adiciona a contribuição deste mecanismo indiretamente.

Para esse trabalho escolheu-se trabalhar com o modelo de Woschni, que se baseia na seguinte equação:

$$\dot{q} = h_{wos} \cdot \left(T - T_{wall}\right) \tag{24}$$

Sendo que o coeficiente global de transferência de calor é obtido através da seguinte correlação:

$$h_{wos} = 129.8 \cdot p^{0.8} \cdot D^{-0.2} \cdot T^{-0.53} \cdot u^{0.8}$$
⁽²⁵⁾

A velocidade característica é calculada da seguinte forma:

$$u(t) = C_1 \cdot v_p + C_2 \cdot \frac{V_{dt} \cdot T_r}{p_r \cdot V_r} \cdot \left[p(t) - p_m \right]$$
(26)

Sendo que a p_r , T_r e V_r são os valores dessas propriedades no momento em que a válvula de admissão é fechada. Os coeficientes C_1 e C_2 possuem valores diferentes para cada evento do ciclo motor e esses valores podem ser consultados em [1]. A pressão em vazio, p_m , pode ser calculada por uma relação politrópica, por exemplo:

$$p_m = p_r \cdot \left(\frac{V_r}{V}\right)^k \tag{27}$$

O valor do coeficiente politrópico pode variar de 1,2 até 1,4, dependendo do combustível.

4.5. Trocas gasosas

As trocas gasosas em um modelo do tipo apresentado nesse trabalho possui fundamental importância, pois aspectos como os pontos de abertura e fechamento das válvulas, *overlap*, *lift*, entre outros, são de fundamental importância para a estimativa de parâmetros de desempenho ou emissões. Porém, como já dito anteriormente, o modelo apresentado neste documento está ainda em fase primária de desenvolvimento, dessa forma nenhum desses aspectos do âmbito das trocas

gasosas está sendo trabalhado, de forma que todas as aberturas e fechamentos das válvulas são considerados instantâneos.

5. A LINGUAGEM DE PROGRAMAÇÃO PYTHON

Python é uma linguagem de programação de alto nível que vem se difundido pelo mundo pela sua dinâmica e conteúdo disponível. Além de ser uma linguagem de programação de código aberto, e dessa forma a liberdade para a programação se torna muito maior. Além disso, conta com uma vasta quantidade de tutoriais e bibliotecas disponibilizadas, muitas vezes, pelos próprios usuários da linguagem.

Atualmente as principais aplicações desta linguagem estão voltadas para o desenvolvimento de sites, software e para aplicações científicas, apesar de existirem códigos sendo desenvolvidos para a execução de diversas outras funções que vão desde aplicativos de celular até aplicações caseiras. O modelo matemático completo deste trabalho é resolvido utilizando o pacote SciPy[9].

6. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta parte do texto serão apresentados alguns resultados obtidos com o modelo proposto. Deve-se lembrar que o objetivo não é alcançar elevada precisão dos resultados com o modelo em relação ou dados experimentais, deseja-se apenas representar o comportamento do fenômeno, de forma que o modelo possa ser futuramente melhorado. Todos os dados analisados são referentes a motores de 4 cursos.

Na figura 3, compara-se dados experimentais de um motor com 4 cilindros em linha, volume deslocado total de 1581 cm³, taxa de compressão igual a 9,2, diâmetro de 86,4 mm, curso de 67,4 mm, relação de equivalência 1,11, velocidade de 3000 rpm e em condição de plena carga. Estes dados experimentais foram obtidos de Millo [10]. Nota-se que os resultados obtidos com o modelo representam com grande fidelidade os dados experimentais, apresentando poucas discordâncias e reproduzindo o comportamento observado nos testes.

A figura 4 mostra os resultados obtidos da simulação de um motor com taxa de compressão 9,4, diâmetro de 72 mm, curso de 61 mm, relação de equivalência 1, velocidade de 1500 rpm e em condição de carga mínima. Os dados experimentais foram obtidos de Chitragar(2015) [11]. Neste caso os resultados do modelo se distanciam dos experimentais, porém ainda notase que o comportamento é mantido, assim como o pico de pressão do ciclo.

A figura 5 mostra os resultados obtidos da simulação de um motor com taxa de compressão 10, diâmetro de 77,4 mm, curso de 85 mm, relação de equivalência 1, ponto de ignição de 26 graus antes do PMS, velocidade de 1400 rpm e uma pressão no coletor de admissão de 61,5 kPa. Os dados experimentais foram obtidos de Ji(2016) [12]. Neste caso os resultados do modelo estão defasados dos dados experimentais, porém pode-se considerar que os resultados representam o comportamento observado na prática.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.



Figura 4: Comparação dos dados de Chitragar [11] com os resultados simulados.

Fonte: Elaborado pelo próprio autor.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

A figura 6 mostra os resultados obtidos da simulação de um motor com taxa de compressão 10, diâmetro de 77,4 mm, curso de 85 mm, relação de equivalência 0,79, ponto de ignição de 22 graus antes do PMS, velocidade de 1400 rpm e uma pressão no coletor de admissão de 61,5 kPa. Os dados experimentais foram obtidos de Martínez(2016) [13]. Nota-se que os resultados obtidos na simulação representam satisfatoriamente o comportamento experimental.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Finalmente, a figura 7 mostra os resultados obtidos da simulação de um motor com taxa compressão de 9,5, diâmetro de 81 mm, curso de 89 mm, relação de equivalência 1, ponto de ignição de 20 graus antes do PMS, velocidade de 3500 rpm e uma pressão no coletor de admissão de 50 kPa. Os dados experimentais foram obtidos de Yusri(2016) [14]. Neste caso, novamente, o comportamento e o pico de pressão são representados, de forma que os resultados podem ser considerados satisfatórios.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Grande parte dos desvios encontrados nos resultados das simulações em relação aos dados experimentais são devidos a causas já antes mencionadas, como, por exemplo, o modelo de trocas gasosas ser muito simplificado, desconsiderando efeitos de *overlap* e *lift*, e também pela ausência de modelos que considerem a influência da turbulência e do intervalo de tempo entre a ignição e o início da liberação de energia durante a combustão. Esses detalhes já estão sendo estudados e estarão presentes em versões futuras do código.

CONCLUSÃO

O modelo apresentado neste trabalho mostra ter um grande potencial para as análises de desempenho de motores de combustão interna. Por se tratar de uma formulação simplificada, os resultados são considerados satisfatórios, sendo que o objetivo inicial foi alcançado, uma vez que já é possível representar o comportamento de casos reais. Está previsto para trabalhos futuros a inserção de modelos mais robustos para questões como as trocas gasosas e atrito, além de módulos para a análise de parâmetros de desempenho e emissões.

A linguagem de programação utilizada mostrou-se muito versátil e dinâmica para a implementação do código, além de ter uma disponibilidade muito grande de ferramentas. Porém, algumas funções apresentam velocidade de processamento inferior às outras linguagens concorrentes, de forma que com o avanço do modelo considera-se a possibilidade de utilizar códigos em Fortran para a realização de tarefas específicas.

REFERÊNCIAS

[1] CURTO-RISSO, P. L., et al. Quasi-Dimensional Simulation of Spark Ignition Engines. London: Springer, 2014.

[2] FENG, H., et al. Availability analysis of n-heptane/iso-octane blends during low-temperature engine combustion using a single-zone combustion model. **Energy Conversion and Management.** China, v. 84, p. 613-622, 2014.

[3] HEYWOOD, J. B. Internal Combustion Engine Fundamentals. New York: McGraq-Hill Book Company, 1988.

[4] HVEZDA, J. Multi-Zone Models of Combustion and Heat Transfer Processes in SI Engines. Journal of Middle European Construction and Design of Cars. 10.2478/v10138-012-0008-6, p. 14-22, 2012.

[5] MELO, T. C. C., Modelagem termodinâmica de um motor do ciclo Otto tipo flex-fuel, funcionando com gasolina, álcool e gás natural. Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 2007.

[6] FERGUSON, C. R., KIRKPATRICK, A. T. Internal Combustion Engines Applied Thermosciences. New York: John Wiley & Sons, 2. ed., 2001.

[7] ANNAND, W. J. D., et al. Instantaneous Heat Transfer Rates to the Cylinder Head Surfece of a Small Compression-Ignition Engine. **Proc. Inst. Mech. Engrs.**, v.185, p. 976-987, 1970-1971.

[8] WOSCHNI, G. Universally Applicable Equation for the Instantaneous Heat Transfer Coefficient in the Internal Combustion Engine. **SAE paper,** v. 76, n. 670931, 1967.

[9] PYTHON. Python is a programming language that lets you work quickly and integrate systems more effectively. Disponível em: <<u>https://www.python.org/</u>>. Acesso em: 24 mai. 2017.

[10] MILLO, F. Esercitazione Volano. Turin: Politecnico di Torino. Publicação Interna.

[11] CHITRAGAR, P. R., et al. An experimental study on combustion and emission analysis of four cylinder 4-stroke gasoline engine using pure hydrogen and LPG at idle condition. **Energy Procedia.** India, v. 90, p. 525-534, 2015.

[12] JI, C., et al. A quasi-dimensional model for combustion performance prediction of an SI hydrogen-enriched methanol engine. **Hydrogen Energy.**, China, v. 41, p.17676-17686, 2016.

[13] MARTÍNEZ-BOGGIO, S. D., et al. Simulation of cycle-to-cycle variations on spark ignition engines fueled with gasoline-hydrogen blends. **Hydrogen Energy.** Uruguai, v. 41, p. 9087-9099, 2016.

[14] YUSRI, I. M., et al. Experimental investigation of combustion, emissions and thermal balance of secondary butyl alcohol-gasoline blends in a spark ignition engine. **Energy Conversion and Management.** Malaysia, v. 123, p. 1-14, 2016.