

## **2**

### **Revisão Bibliográfica**

#### **2.1.**

##### **Gasolinas e formulações reduzidas**

##### **2.1.1.**

###### **Componentes de gasolinas**

Os numerosos fenômenos físicos que ocorrem nos motores de combustão interna são complexos, envolvendo mecânica dos fluidos, vaporização, formação de mistura e combustão em uma ampla faixa de temperatura e pressão. O impacto nas variáveis de desempenho do motor é o resultado da interação entre diversos fenômenos, influenciados pelas características e propriedades dos combustíveis. Uma gasolina é composta por centenas de componentes em pequenas proporções (Machado, 2007), a maior parte deles provenientes da destilação do petróleo cru. A faixa de destilação da gasolina compreende hidrocarbonetos de cadeias  $C_4$  a  $C_{12}$ , representados principalmente por parafinas (alcanos), naftenos (cicloparafinas ou cicloalcanos) e aromáticos. Processamento adicional é necessário para elevação da octanagem e enquadramento nas especificações. As olefinas (alcenos), hidrocarbonetos insaturados, não estão presentes naturalmente no petróleo cru, mas são produzidas nas refinarias e possuem a característica de ter elevada octanagem. Devido à presença de ligações duplas, as olefinas são compostos menos estáveis, degradando por oxidação com maior facilidade, caso existam elementos precursores que iniciem este processo, o que pode contribuir para acelerar o envelhecimento do produto. A Figura 2.1 ilustra a variação de composição típica em gasolinas comerciais norte-americanas. As variações encontradas nas gasolinas nacionais puras, antes da mistura obrigatória com o etanol anidro, estão em faixas semelhantes.

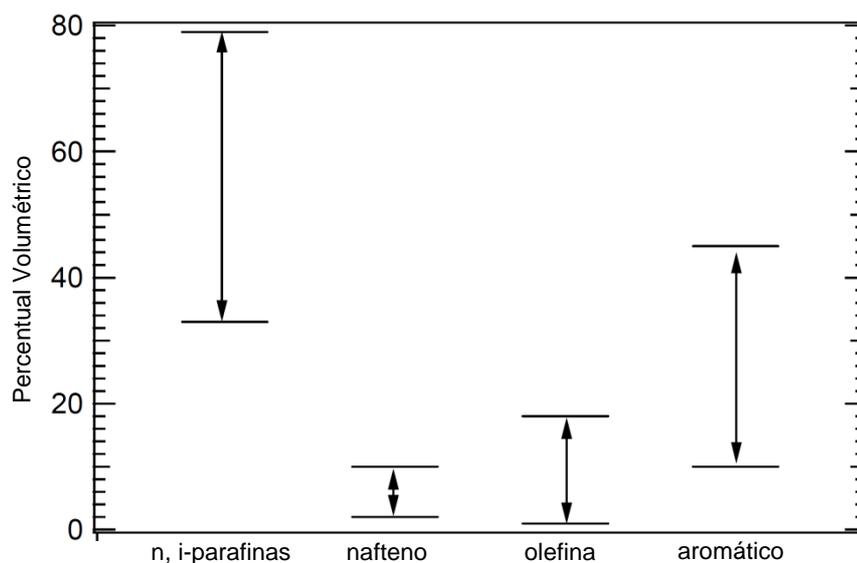


Figura 2.1 – Faixa aproximada de parafinas, naftenos, olefinas e aromáticos em gasolinas comerciais norte-americanas (adaptado de Pitz et al., 2007).

Na gasolina, as parafinas são constituídas principalmente por iso-parafinas (cadeias ramificadas) na faixa  $C_5$  a  $C_7$ . Isto ocorre devido à existência de um número maior dos isômeros de iso-parafinas em relação às correspondentes n-parafinas (cadeias lineares) de mesmo número de átomos de carbono. Além disso, pode haver a inclusão seletiva de iso-parafinas como meio de elevação da octanagem. O iso-octano pode representar percentuais elevados em gasolinas *Premium* (octanagem mais elevada) (Pitz et al., 2007). Os naftenos são representados principalmente por subprodutos de processos de refino, como, por exemplo, conversão em aromáticos nos reformadores (Owen & Coley, 1995), sendo os isômeros  $C_6$  a  $C_7$  os mais comuns, principalmente o metil-ciclopentano e o metil-ciclohexano. As olefinas seguem a tendência geral das parafinas, com os isômeros de cadeia ramificada  $C_5$  a  $C_7$  prevalecendo sobre as estruturas de cadeia linear. Os aromáticos apresentam cadeias com maiores números de carbono, refletindo a instabilidade de aromáticos de cadeia  $C_4$  e  $C_5$  e a limitação do benzeno ( $C_6H_6$ ) devido à sua toxicidade. Os mais comuns são o tolueno e m-xileno (Machado, 2007; Pitz et al., 2007).

Os oxigenados são outra classe de compostos que não estão presentes naturalmente no petróleo cru em níveis consideráveis, porém podem ser misturados à gasolina nos terminais, como, por exemplo, o éter metil terciário-butílico (*MTBE - Methyl Tertiary-Butyl Ether*) nos EUA, até a década passada, e o etanol, no caso do Brasil. Devido ao menor conteúdo de carbono e presença de

oxigênio, podem contribuir para a redução de emissões de monóxido de carbono (CO) pelos motores. Estes produtos apresentam octanagem elevada, auxiliando na redução da adição de chumbo tetraetila para aumentar a octanagem em gasolinas. O chumbo tetraetila é tóxico e danifica os catalisadores automotivos. A adição de etanol nas formulações de gasolina automotiva brasileira permitiu o banimento total do chumbo tetraetila a partir de 1989.

A Figura 2.2 ilustra as estruturas representativas das diferentes classes moleculares encontradas em gasolinas comerciais.

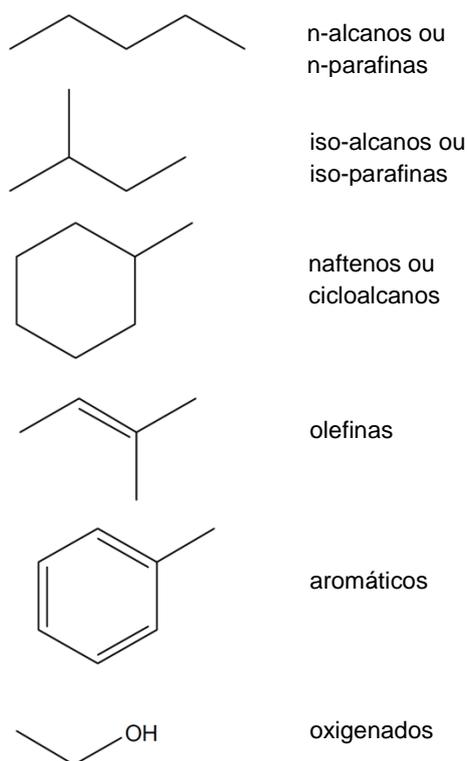


Figura 2.2 - Estruturas representativas das diferentes classes moleculares encontradas em gasolinas comerciais (adaptado de Pitz et al., 2007).

### 2.1.2. Gasolinas comerciais nacionais

As gasolinas comerciais se enquadram em especificações restritas, que levam em conta sua volatilidade, octanagem, estabilidade e uma série de outros parâmetros de qualidade. Apesar disso, há uma variação ampla de composições entre diferentes gasolinas comerciais (Figura 2.1), refletindo diferenças na fonte do petróleo cru e nos vários processos de refino utilizados para a obtenção do produto acabado, dentre os quais podem ser citados: destilação; recuperação de

gasolina natural; craqueamento; hidrocraqueamento; reforma; alquilação; polimerização e isomerização.

A utilização do etanol como aditivo renovável para a gasolina é comum em países como o Brasil, EUA e países da Europa. Desde a década de 1970, o Brasil opera veículos movidos com 100% de etanol derivado da cana-de-açúcar. Nesta época o governo brasileiro desenvolveu o Programa Nacional do Álcool (PROÁLCOOL) (Brasil - Governo Federal, 1975), que promoveu a incorporação do etanol na matriz de combustíveis do país. A gasolina regular brasileira contém obrigatoriamente etanol anidro em sua composição. O percentual em volume de mistura varia atualmente de 18 a 25%, segundo a Medida Provisória nº 532 de 2011 (Brasil – Governo Federal, 2011), de acordo com a produção de etanol e as condições do mercado internacional para comercialização de açúcar.

Existem especificações nacionais para as gasolinas comuns A e C. A gasolina A não contém etanol e não pode ser comercializada para a rede de abastecimento. A gasolina A é a base para a elaboração da gasolina C, que contém etanol anidro em sua formulação e pode ser comercializada na rede de postos de abastecimento. Além das especificações para gasolina comum (regular), existem as especificações para as gasolinas *Premium A* (sem etanol) e *C* (com etanol), cujas diferenças principais em relação às gasolinas comuns são suas octanagens superiores. A gasolina *Premium C* possui Índice Antidetonante (IAD) de no mínimo 91 enquanto a gasolina comum *C* possui IAD mínimo de 87. As especificações atuais das gasolinas automotivas nacionais foram estabelecidas na Resolução ANP nº 57 de 2011. (Brasil – ANP, 2011).

### **2.1.3. Formulações reduzidas**

A relação entre os componentes principais presentes nas gasolinas com as características de combustão e variáveis de desempenho como potência, consumo, consumo específico e emissões dos motores é um campo fértil para investigações.

O presente trabalho propõe o termo formulações reduzidas para representar em português o termo usualmente utilizado em inglês, *surrogate fuels* (Andrae, 2008). Outros termos que poderiam ser empregados são a tradução literal, combustível substituto ou simulacro de combustível. Formulações reduzidas são

formulações que utilizam um número reduzido de componentes presentes em combustíveis comerciais. Busca-se que estas formulações representem o comportamento do combustível original. A gasolina, como visto, é uma mistura complexa de hidrocarbonetos com espectro de característica contínua. Formulações reduzidas são interessantes, pois limitam a complexidade físico-química, o que é desejável para entendimento dos processos fundamentais envolvidos nos motores de combustão interna. Esta investigação também é importante, pois possibilitará a representação do combustível com alguns poucos componentes nos programas computacionais de simulação de motores de combustão interna. Hoje, esses programas apresentam limitações quanto à representatividade dos combustíveis, restringindo sua aplicabilidade como ferramenta para desenvolvimento de combustíveis.

Adicionalmente, simular o comportamento de um combustível real, ou seja, considerando todos os seus componentes, esbarra em problemas de limitações de processamento dos computadores existentes atualmente, mesmo os mais avançados.

As formulações reduzidas mais simples utilizadas consistem de apenas um componente. Por exemplo, o iso-octano é frequentemente utilizado para representar a gasolina (Heywood, 1988; Ferguson, 1986), inclusive em programas destinados à simulação de motores de combustão interna, como o *BOOST* e *FIRE* da AVL (AVL, 2011, 2010). As versões mais recentes destes programas comerciais podem incorporar mais de um componente e possuem representação para a gasolina, porém com limitações na definição de suas propriedades e desconhecimento da cinética química de reações.

Misturas binárias de n-heptano e iso-octano, conhecidos como *PRF* (*Primary Reference Fuels*), são utilizadas para caracterizar a gasolina no que se refere à octanagem, propriedade que indica a resistência do combustível à autoignição.

Pitz et al. (2007) apresentaram trabalho de revisão sobre formulações reduzidas, descrevendo as possibilidades de componentes e classificando sua importância e disponibilidade de dados termofísicos, de transporte e o nível de desenvolvimento de mecanismos cinéticos de reação. Seus estudos indicam que pelo menos três componentes, n-heptano, iso-octano e tolueno, devem estar presentes nas formulações reduzidas de gasolinas. Estes componentes são

representantes das principais classes de hidrocarbonetos presentes na gasolina, as parafinas e os aromáticos. Em mistura podem representar diferentes níveis de octanagem. Existem dados de propriedades termofísicas e de transporte razoavelmente disponíveis para realização de modelagens. Existe um entendimento satisfatório dos mecanismos cinéticos de reações de baixa e alta temperaturas dos componentes isolados, com exceção do tolueno. Além destes fatos, o tolueno é o aromático mais abundante presente na gasolina e, como visto, o iso-octano está presente em teores consideráveis em gasolinas *Premium*, o que reforça a importância e representatividade destes componentes.

Encontram-se na literatura diversos estudos para desenvolvimento de modelos de cinética química para a combustão do iso-octano (Curran et al., 2002; Davidson et al., 2005; He et al., 2005), n-heptano (Curran et al., 1998; Herzler et al., 2005; Silke et al., 2005; Berta et al., 2006) e tolueno (Emdee et al., 1992; Dagaut et al., 2002; Pitz et al., 2003; Davidson et al., 2005; Bounaceur et al., 2005; Sivaramakrishnan, 2005; Andrae et al., 2007). Andrae (2008) apresentou um modelo detalhado de cinética química para descrever a autoignição de formulações reduzidas consistindo de iso-octano, n-heptano, tolueno, diisobutileno e etanol. As predições do modelo desenvolvido foram comparadas com dados experimentais de atraso de ignição de formulações reduzidas de gasolinas em tubo de choque, para várias condições de temperatura e pressão. O modelo se mostrou sensível às variações de temperatura e pressão na faixa típica encontrada em motores de combustão interna.

Bradley et al. (2004) e Bradley & Head (2006) mostraram que os atrasos de ignição de combustíveis que não são primários de referência (não *PRFs*) e dos seus correspondentes *PRFs* são praticamente iguais na condição de temperatura e pressão máximas do ciclo, tanto no ensaio de octanagem *RON* (*Research Octane Number*) como no *MON* (*Motor Octane Number*). Estes ensaios são regidos, respectivamente, pelas normas *ASTM D2699* e *ASTM D2700* (*ASTM*, 2009a, 2009b). Os autores apresentaram alguns valores para os picos de temperatura e pressão dos gases não queimados, para diferentes valores de *MON*. Leppard (1990) apresentou valores para os picos de temperatura e pressão dos gases não queimados em outras condições de *MON*.

Seguindo Bradley & Head (2006) e Leppard (1990), o modelo cinético desenvolvido por Andrae (2008) também foi capaz de prever qualitativamente

os comportamentos sinérgicos e antagônicos não lineares da octanagem *MON* para diferentes combinações de misturas de *PRFs* com combustíveis não *PRFs*. Isto foi realizado através de correlações entre o atraso de ignição, calculado pelo modelo na condição de máxima pressão e temperatura dos gases não queimados do teste *MON*, com o respectivo valor experimental do teste *MON*, abrangendo a faixa de 73 a 95. Os resultados do comportamento não linear das misturas de componentes foram interpretados em termos da química de autoignição.

Os estudos de cinética química estão baseados em experimentos conduzidos em diferentes equipamentos, tais como máquinas de compressão rápida, tubos de choque e câmaras de volume constante, em diferentes condições termodinâmicas. Os mecanismos cinéticos desenvolvidos podem ser utilizados tanto para prever o atraso de ignição de combustíveis como sua velocidade de chama laminar, temperaturas desenvolvidas e composição dos produtos de combustão.

Na literatura existem poucas correlações entre o desempenho de formulações reduzidas em experimentos mais controlados em máquinas de compressão rápida, tubos de choque e câmaras de volume constante e a habilidade da formulação reduzida para reproduzir o desempenho da gasolina no motor. Nos experimentos típicos realizados para desenvolvimento e validação de mecanismos cinéticos, as condições de teste são simplificadas, para isolar determinados efeitos, não sendo as mesmas de um motor comercial. Andrae (2008) apresentou como uma correlação deste tipo poderia ser realizada. Entretanto, atualmente o desempenho e comportamento de queima de formulações reduzidas nos modernos motores de combustão interna não são bem conhecidos. Não foram encontrados dados experimentais sistemáticos de formulações reduzidas em motor, nem metodologias que correlacionem as influências de diferentes componentes nas características de combustão e parâmetros de desempenho de motor comercial. Conforme já explanado, este entendimento é importante para o desenvolvimento de combustíveis em geral, incluindo formulações para aplicações específicas, como por exemplo, competições automotivas.

As pesquisas e experimentos em motor com componentes puros de gasolina ou com formulações reduzidas, na sua grande maioria resumem-se a testes em motores *CFR* (*Cooperative Fuel Research Engine*), utilizados nos ensaios de determinação de octanagem, que possuem projetos antigos (Leppard, 1990; Bradley & Head, 2006; Andrae, 2008). As características da combustão são

avaliadas principalmente pelos testes de octanagem, sendo a correlação com motor comercial muitas vezes limitada a esta propriedade. A velocidade de queima, por exemplo, não é um parâmetro considerado. Torna-se importante um melhor entendimento de como as propriedades dos combustíveis interagem no ambiente do motor comercial.

## **2.2. Simulação de motores de combustão interna**

### **2.2.1. Modelos de motores**

A construção do primeiro motor de combustão interna do ciclo Otto ocorreu em 1876. Em 1892, Diesel desenvolveu um motor de ignição por compressão (Obert, 1971). As análises de ciclos de motores a pistão e o desenvolvimento de modelos de simulação vêm, ao longo dos anos, auxiliando no desenvolvimento tecnológico contínuo deste equipamento. Em primeiro momento desenvolveram-se modelos algébricos baseados na termodinâmica clássica, assumindo hipóteses simplificadoras para obtenção de soluções fechadas. Esta metodologia, chamada de Análise de Ciclo Ideal, permite o estudo dos processos básicos envolvidos nos ciclos de motores e realização de estimativas da sua máxima eficiência térmica. A análise define os termos e relações fundamentais para o estudo e modelagem de motores, encontrados nos livros técnicos especializados, dentre os quais importantes referências são: Taylor, 1968 (ver Taylor, 1988, edição em língua portuguesa); Ferguson, 1986; Heywood, 1988 e Stone, 1995. Cabe ressaltar que os motores Otto e Diesel foram as primeiras máquinas térmicas a serem projetadas usando a teoria dos ciclos termodinâmicos, ou seja, o seu funcionamento foi previsto por simulação antes da sua construção física.

Uma classificação de modelos utilizados em simulações de motores de combustão interna é apresentada por Stone, 1995, dividindo estes em três grupos, descritos a seguir. Barros (2003) acrescenta um quarto grupo, referente a modelos algébricos para tornar a classificação mais abrangente. Todos os modelos visam fazer previsões do desempenho, eficiência e emissões do motor de combustão interna.

Algébrico - utiliza um sistema de equações algébricas derivadas de relações da termodinâmica clássica, associadas a eficiências que corrigem os resultados do ciclo ideal para um ciclo real. Os sistemas de controle em tempo real utilizam este tipo de modelo devido ao seu baixo custo computacional e a facilidade de se introduzir correções empíricas para um motor específico. Os modelos algébricos são utilizados também para simulações de emissões em ciclos de condução de veículos.

Zero dimensional ou Fenomenológico – utiliza um sistema de equações diferenciais ordinárias, associadas a uma série de modelos empíricos para simular o motor. As características internas obtidas do escoamento representam valores médios. Atualmente, é o único método que permite modelar completamente um motor a pistão multicilindro. Um método numérico típico de solução do sistema de equações resultantes é o Runge-Kutta.

Quase dimensional - utiliza um sistema de equações diferenciais parciais, associadas também a uma série de modelos semiempíricos, tais como, de turbulência, de chama turbulenta, etc. Normalmente, assume como variáveis independentes o tempo ou ângulo da árvore de manivelas, e uma dimensão axial (comprimento dos dutos de admissão ou descarga ou raio da frente de chama). Por isto é também chamado unidimensional (1D). O método mais usado aqui para solução do sistema de equações é o método das características.

Multidimensional - é semelhante aos modelos quase dimensionais, mas envolve mais de uma dimensão física (2D e 3D), além da dimensão temporal. Estas simulações exigem uma descrição detalhada da configuração física da parte do motor estudada. Os métodos numéricos de solução mais usados são Volumes Finitos, Diferenças Finitas e Elementos Finitos (métodos discretizados).

Melo (2007) realiza uma boa revisão sobre as diversas classificações dos modelos de motores e combustão existentes na literatura, fornecendo como referências principais Heywood (1980), James (1984) e Ramos (1989). Ele adota em seu trabalho a terminologia sugerida por Heywood (1980), que também foi seguida na classificação geral de Stone (1995), dividindo os modelos em três categorias: zero dimensionais, quase dimensionais e multidimensionais. Os modelos zero dimensionais e os quase dimensionais também são chamados de termodinâmicos, pois são estruturados em termos da análise termodinâmica do fluido de trabalho.

O trabalho de Heywood (1988), que é considerado um dos mais abrangentes na área de motores de combustão interna, também descreve os três tipos de modelos classificados por Stone (1995), detalhando os modelos multidimensionais envolvendo turbulência, atomização de combustível e combustão.

Outra classificação dos modelos de motores é encontrada em Massa (1992), que os divide em caráter preditivo ou de diagnóstico. Os modelos preditivos objetivam uma previsão de desempenho, consumo e emissões do motor a partir da modelagem dos fenômenos físicos e químicos que governam os seus processos. Um modelo totalmente preditivo é extremamente complexo, pois o conhecimento da taxa de queima e da velocidade de propagação da chama, por exemplo, não estão disponíveis a priori para diferentes combustíveis e condições operacionais em determinado motor. O modelo de diagnóstico propõe a substituição de submodelos de complexidade elevada ou que utilizam hipóteses construídas empiricamente, por dados experimentais. Ao se utilizar dados experimentais como dados de entrada do modelo, este se torna representativo da condição testada e os seus resultados serão um diagnóstico da mesma. Dentro de um modelo do tipo diagnóstico podem existir submodelos preditivos ou vice-versa.

O programa *GCA (Gas Exchange and Combustion Analysis Software)* da AVL (AVL, 2009a) utiliza, por exemplo, os dados experimentais de pressão no interior do cilindro do motor para calcular as trocas de massa pelas válvulas e coletores de admissão e descarga, que por sua vez podem ser utilizadas pelo programa *BOOST* (AVL, 2011) como condições de contorno na simulação da combustão.

Uma revisão detalhada de modelos de simulação é apresentada por Pücher (1986). Os submodelos são divididos de acordo com o sistema do motor que representam, da seguinte forma: I – processos internos ao cilindro; II - escoamentos na admissão e na exaustão (descarga); III - balanço de massa e energia no turbocompressor; IV - acionamento mecânico sob carga. Os submodelos aplicáveis em I incluem: representação das características geométricas; representação do escoamento no cilindro através das equações de conservação da massa e da energia mais a equação de estado dos gases; transferência de calor usando uma equação empírica devida a Woschni (1967) e velocidade da combustão usando a lei de Wiebe (1967). A relação proposta para a

transferência de calor é de fácil implementação por não envolver avaliação direta das propriedades de transporte dos gases de combustão. Em II pode-se utilizar o chamado modelo de enchimento e esvaziamento baseado nas equações de conservação da massa e energia em função do tempo e do volume, e o modelo de onda, aplicado ao escoamento transiente nos condutos de admissão e exaustão. O modelo de onda pode ser resolvido por diferentes técnicas de solução, como o método das características, volumes finitos, entre outras. O modelo de enchimento e esvaziamento inclui os balanços no turbocompressor (III) usando eficiências retiradas dos mapas do compressor e turbina. Também são considerados os efeitos de uma configuração multicilindro. A diferença entre os resultados do modelo de enchimento e esvaziamento e do modelo de onda é pequena a baixas rotações, porém os picos de pressão são amortecidos no primeiro modelo nas altas rotações. O modelo aplicável a IV inclui o movimento rotativo considerando as inércias do motor associadas às do dispositivo aplicador da carga. Os resultados permitem boas avaliações dinâmicas do comportamento do motor.

Assim, a modelagem de motores é composta por vários submodelos, que por sua vez podem apresentar diferentes níveis de detalhamento, com características algébricas, zero dimensionais, quase dimensionais ou multidimensionais. Além disso, a modelagem pode apresentar características de predição ou diagnóstico em diferentes submodelos.

Benson (1982) apresenta modelos que tratam especificamente dos fenômenos transientes nos coletores dos motores a pistão. Os modelos apresentados baseiam-se na solução analítica ou numérica da equação da onda, usando condições de contorno típicas dos motores de combustão interna. O método das características é o utilizado para obter as equações descritivas.

Ferguson (1986) apresenta modelos orientados para a computação, com programas em *FORTRAN* para a simulação de vários aspectos da modelagem de motores, como a combustão, perdas de calor, enchimento e esvaziamento do cilindro, composição e propriedades termodinâmicas dos gases de combustão e injeção de combustível. As propriedades termodinâmicas dos gases de combustão são calculadas usando os procedimentos desenvolvidos por Gordon & McBride (1971), considerando o equilíbrio químico e dados termodinâmicos das tabelas *JANNAF*. As propriedades de transporte de mistura de gases de combustão,

necessárias aos modelos de transferência de calor, são calculadas usando técnicas semelhantes às descritas por McBride et al. (1993).

Blair (1999) apresenta modelagem computacional de motores de quatro tempos e dois tempos, que pode ser classificada como quase dimensional, enfocando os fenômenos transientes ligados ao escoamento de enchimento e esvaziamento do cilindro do motor a pistão. O método numérico mais aplicado ao longo do trabalho é o método das características no domínio do tempo e com uma dimensão axial (1D), associado a soluções fechadas de casos transientes típicos de dinâmica de fluidos compressíveis. Uma parte do trabalho é dedicada ao estudo de geração de ruído nos motores e técnicas para sua redução.

Wooddard et al. (1989) realizam a otimização de turbocompressores utilizando um programa de simulação zero dimensional. O objetivo foi minimizar o consumo de combustível, considerando compromisso entre torque, detonação (batida de pino ou *knocking*), emissões e os limites de validade dos modelos usados. O modelo é quase permanente para avaliar variações na velocidade de rotação do motor. Outras características do modelo são: cálculo de torque e consumo específico para motores multicilindros; influência da mistura ar/combustível; escoamento compressível; modelo global para o compressor e turbina usando mapas de componentes; temperatura de chama calculada considerando equilíbrio químico e produtos de combustão completa do combustível; velocidade de queima empírica; mistura de gases com propriedades termodinâmicas calculadas a partir das tabelas *JANNAF* e transferência de calor pelo modelo de Woschni (1967). Esta é a primeira implementação de modelos da teoria de detonação de Ricardo (1922), descrita por Taylor (1988), que exige o cálculo da combustão por um modelo de duas zonas, uma para os gases não queimados e outra para os gases queimados, considerando a pressão uniforme e temperaturas diferenciadas entre as duas zonas. Os autores realizaram simulações para um motor 6 cilindros em V com um bom ajuste dos resultados aos dados experimentais.

Kanamaru et al. (1994) apresentam outro trabalho de otimização de turbocompressores para motores a pistão. Os modelos do motor e do turbo são zero dimensionais. O motor é tratado de forma paramétrica através da eficiência volumétrica e do volume deslocado em função da rotação. O combustível é tratado como fonte de energia através do poder calorífico inferior. A turbina e o

compressor são tratados como escoamento através de orifícios, introduzindo o balanço de energia devido à rotação do rotor. Um vínculo entre a turbina e o compressor é estabelecido pela mesma velocidade de rotação e pelo balanço de potência no rotor. Também é simulado o trocador de calor (*intercooler*) usado nos sistemas de turbocompressores para resfriamento do ar na entrada dos cilindros. O modelo é também paramétrico, baseado nas eficiências térmicas do trocador de calor. Os dutos de admissão e exaustão são modelados como causadores de perda de carga e perda de calor através de modelos paramétricos (empíricos).

Lira (1999) apresenta um modelo zero dimensional para um motor do ciclo Diesel. As características do modelo são: modelo de queima pela lei de Wiebe modificada para ciclo Diesel; utilização de duas equações, a da conservação de massa e da energia; transferência de calor tratada conforme o modelo de Eichelberg; enchimento e esvaziamento do cilindro são considerados isentrópicos; utiliza relações empíricas para estimar a razão dos calores específicos dos gases de combustão. O ajuste entre o diagrama de pressão calculado e o medido é considerado bom.

Rego & Martins (2001) aprofundam o modelo de cames e acionamento das válvulas proposto por Porto & Bezerra (1999), mostrando como este pode ser associado a um modelo de motor de combustão interna. Em termos de modelos multidimensionais, Deschamps (1993, 1995) apresenta análise sobre o escoamento turbulento bidimensional através da válvula do motor. O enfoque principal foi a determinação dos perfis de velocidade ao redor da válvula e no interior do cilindro utilizando um modelo algébrico de segunda ordem para descrever a turbulência. O volume do cilindro foi mantido constante, ou seja, não foi considerada a influência do movimento alternativo do pistão. Heywood (1988) também descreve resultados de modelos multidimensionais. Toledo et al. (2002) utilizam um modelo de turbulência tipo *LES (Large Eddy Simulation)*, tridimensional e com malha adaptativa para levar em conta o movimento do pistão. Contudo, a maioria destes modelos está mais preocupada em testar parâmetros de turbulência ou prever zonas de estagnação de mistura do que obter os valores dos coeficientes de descarga das válvulas. Um modelo multidimensional pode ser usado para prever os coeficientes de descarga, o que possibilita desenvolver um modelo semiempírico mais preciso para ser utilizado nos modelos quase dimensionais. Outro problema destes modelos encontrados na

literatura é a dificuldade de relacionar os campos de velocidades no interior do cilindro com as leis empíricas para velocidade média do gás ou com previsões da equação de quantidade de movimento. Barros (2003) apresenta um modelo de efeito de cruzamento de válvulas (efeito *RAM*), baseado na equação da quantidade de movimento dentro do cilindro e uso da pressão dinâmica calculada no interior do cilindro.

Barros (2003) desenvolveu modelagem computacional para predição do desempenho (potência, torque e consumo específico) de motores de ignição por centelha. O código computacional foi implementado em linguagem orientada ao objeto, de forma a facilitar futuras atualizações e também a disponibilizar o uso para a comunidade automotiva. A modelagem foi feita em etapas com aumento de complexidade em cada uma delas. Inicialmente foi feito um modelo simples baseado apenas em equações algébricas do motor, sendo este modelo substituído por um modelo zero dimensional, para depois ser implantado o modelo quase dimensional. Foram também implantados submodelos unidimensionais de forma a representar os fluxos de ar de admissão e de exaustão, incluindo a solução da equação de quantidade de movimento para o cálculo da velocidade do gás. O programa final, denominado *CARE* (*Cycle Analysis for Reciprocating Engines*), foi validado com base em resultados experimentais de um motor monocilindro a gasolina. Os resultados mostraram que o modelo é capaz de prever o desempenho de um motor de ignição por centelha, com desvios de até 4% em relação aos resultados experimentais. O modelo também foi capaz de prever o ângulo de avanço de ignição em que ocorre a detonação, estimar o efeito de *blow-by* no ciclo e na pressão do cárter, entre outras características. Esse modelo foi usado na simulação de um motor multicilindro, com o uso de gasolina, para diferentes razões volumétricas de compressão (De Paula, 2006).

Barros (2003) apresenta um resumo dos diversos modelos aplicáveis aos motores de combustão interna, incluindo os modelos presentes no *CARE*, conforme pode ser observado na Figura 2.3,

GRUPO TECNOLÓGICO	Modelo de enchimento e esvaziamento de coletores	Modelo 1D de coletores	Modelo de Blow-by	Modelo de válvulas trompette	Modelo de injeção de combustível	Modelo de equilíbrio químico	Modelo de cinética química	Modelo de uma zona (Lei de Wiebe)	Modelo 3D da câmara de combustão	Modelo de duas zonas (Pb=Pub)	Modelo de onda de combustão	Modelo de detonação	Modelo de fator de turbulência	Modelo de atmosfera	Modelo de efeito Venturi	Modelo de válvula borboleta	Modelo dinâmico pistão/biela	Modelo dinâmico de ciclo (Conservação da quantidade de movimento no cilindro)	Modelo de velocidade de Woschni	Modelo de turbocompressor
CARE																				
Escola Inglesa e Indiana																				
Escola Americana																				
Escola Germânica																				
Escola Latina																				

#### Inovações

Escola Inglesa: Benson, 1982, Horlock e Winterbone, 1986, Baruah, 1986, Sodr , 1998, Blair, 1999

Escola Indiana: Mohanan e Babu, 1991

Escola Americana: Heywood, 1988, Ferguson, 1986, Woodard, Johnson e Lott, 1989, Crawford, Celik e Lyons, 1993

Escola Germ nica: Puscher, 1986

Escola Latina: Gallo, 1990, Pereira, 1995, Vianna, Oliveira e Oliveira, 1996, Nigro, Ambroggi e DeFranco, 1999, Hanriot, 2001

Figura 2.3 – Modelos aplic veis   simula o de motores de combust o interna (reproduzido de Barros, 2003).

Existem programas computacionais comerciais destinados   simula o completa de motores, dentre os quais se podem citar o *BOOST* e o *FIRE* (AVL, 2011, 2010), desenvolvidos pela AVL, o programa *GTPOWER* (Gamma Technologies Inc., 2011), desenvolvido pela Gamma Technologies, o *WAVE* e o *VECTIS* (Ricardo Plc., 2011), desenvolvidos pela Ricardo, entre outros. Os programas *BOOST*, *GTPOWER*, *WAVE* e outros programas unidimensionais s o utilizados para c lculos mais sist micos, auxiliando no desenvolvimento de motores. Na maioria dos casos, resolvem somente as equa es de conserva o de massa e energia dentro do cilindro. Utilizam modelos de combust o onde a taxa de queima   previamente definida, normalmente a partir de dados experimentais. O *FIRE*, o m dulo 3D do *GTPOWER*, o *VECTIS* e outros programas multidimensionais resolvem as equa es de conserva o de massa, energia e quantidade de movimento dentro do cilindro. Utilizam modelo de combust o que propaga a chama turbulenta no interior do cilindro. Os custos computacionais dos programas multidimensionais s o bastante elevados.

## 2.2.2. Modelos de combust o

Devido   sua import ncia e rela o com o presente trabalho, esta se o descreve especificamente os modelos de combust o usualmente adotados nas simula es de motores.

Com relação à classificação dos modelos, na literatura não existe uma separação rígida entre a modelagem da combustão e a modelagem do motor com seus subsistemas. Muitas vezes, a classificação dos modelos de combustão engloba outros submodelos do motor, como, por exemplo, a admissão da mistura ar-combustível, compressão da mistura, exaustão dos produtos de combustão, representação da câmara de combustão, entre outros. Conforme visto na seção anterior, estes modelos usualmente são classificados em algébricos, zero dimensionais, quase dimensionais e multidimensionais. Na classificação geral não há uma distinção específica em relação à forma como a taxa de liberação de calor é modelada.

Ramos (1989) classifica os modelos de combustão dividindo-os em quatro classes: zona simples (uma zona), multizona (que pode incluir o de duas zonas), unidimensional e multidimensional. Nos modelos de uma zona, as propriedades do fluido de trabalho são uniformes ao longo de todo o volume para cada instante de tempo. No conceito de duas zonas, modela-se uma zona queimada, constituída pelos produtos de combustão, e uma zona não queimada, constituída pela mistura ar-combustível. Na multizona modela-se mais de duas zonas com diferentes estágios de queima. Por sua vez, na modelagem multidimensional, cada célula da malha de discretização é dividida em duas zonas (queimada e não queimada). Assim, nos modelos de uma, duas e multizona as zonas representam volumes macroscópicos do interior do cilindro, enquanto no multidimensional são pequenos volumes em relação ao volume total. O modelo de duas zonas é suficiente para modelagem da combustão pré-misturada, típica dos motores de ignição por centelha, enquanto multizona é mais adequado para misturas heterogêneas dos motores de ignição por compressão.

O presente trabalho fará uma descrição da modelagem de combustão focando na forma em que a taxa de liberação de calor de combustão é modelada, relacionando-a, quando necessário, com a modelagem de outros subsistemas do motor associados à combustão. De uma maneira geral existem duas formas principais de se modelar a taxa de liberação de calor. Na primeira adota-se uma taxa de queima definida e na segunda modela-se a velocidade de propagação da chama turbulenta no interior do cilindro.

### 2.2.2.1. Taxa de queima definida

A taxa de liberação de calor pode ser definida previamente, usualmente a partir de dados experimentais. Neste caso, normalmente realiza-se a modelagem usando a lei de Wiebe (1967), baseada em modelo de cinética global. Esta forma de representação da queima pode estar associada a uma modelagem de uma ou duas zonas para a câmara de combustão. Conforme dito anteriormente, na modelagem de uma zona o fluido de trabalho apresenta propriedades uniformes em toda a câmara de combustão, enquanto na modelagem de duas zonas existe uma separação da câmara de combustão em zona não queimada e zona queimada. A pressão na câmara de combustão é modelada como uniforme, porém a temperatura e composição dos gases são diferentes em cada zona. Portanto, a lei de Wiebe pode estar associada à modelagem zero dimensional ou quase dimensional da câmara de combustão. A composição dos gases no interior da câmara de combustão pode ser modelada pela combustão completa, condição de equilíbrio químico ou utilizando cinética química. Na modelagem por equilíbrio químico ou cinética química, pode-se estimar a emissão de poluentes. O modelo de equilíbrio químico mais elaborado, e que deve ser usado para estudo de emissões, é o proposto por Gordon & McBride (1971), e implementado no programa conhecido por *NASA-SP-273*. O método de solução para a composição dos gases é o de minimização da energia livre de Gibbs. Podem existir submodelos específicos para cálculo dos poluentes, como o mecanismo cinético de Zeldovich (ver Strehlow, 1985) para formação de  $\text{NO}_x$ .

Lanzafame & Messina (2003) mostram que o modelo termodinâmico zero dimensional utilizando a lei de Wiebe permite uma descrição adequada dos fenômenos físicos (fração de massa queimada, calor liberado durante a combustão e pressão de combustão), com simplicidade matemática que garante baixo custo computacional. Normalmente, os modelos termodinâmicos de uma zona podem variar de acordo com a forma de equacionamento da razão de calores específicos do fluido de trabalho,  $\gamma$ , que pode ser assumido como constante ou variar com a temperatura e a composição dos gases. Estes modelos também variam pela consideração ou não de perda de calor pelas paredes (Melo, 2007).

A desvantagem da utilização da lei de Wiebe reside na necessidade de dados experimentais da taxa de queima para a determinação adequada dos seus três parâmetros de entrada (os expoentes,  $a$ ,  $m$  e a duração da combustão,  $\Delta\theta_c$ ), conforme a eq. (2.1),

$$X_b = 1 - \exp \left[ -a \left( \frac{\theta - \theta_{ig}}{\Delta\theta_c} \right)^{m+1} \right] \quad (2.1)$$

onde  $X_b$  é a fração de massa queimada até o ângulo de virabrequim,  $\theta$ , e  $\theta_{ig}$  é o ângulo de avanço de ignição (Barros, 2003).

Os parâmetros de entrada variam com o tipo de motor, condição operacional e tipo de combustível adotado. O parâmetro  $a$  está relacionado com o combustível e geometria do motor, enquanto  $m$  está relacionado com a ordem da reação de combustão e duração de queima, dependendo do combustível e rotação do motor (Heywood, 1988). Desta forma a modelagem é limitada no que diz respeito à predição.

Melo (2007) e Melo et al. (2007) apresentam modelagem uma zona de motor multicomcombustível, adaptado para operar também com gás natural a partir de um kit de conversão. A modelagem utilizada adotou a lei de Wiebe para descrever a taxa de liberação de calor. Foram realizados ensaios experimentais utilizando gasolina nacional, etanol hidratado e gás natural. A modelagem foi capaz de reproduzir a curva de pressão de combustão com boa precisão para os diferentes combustíveis em diferentes condições operacionais. Os parâmetros  $a$  e  $m$  foram ajustados em função dos dados experimentais de cada combustível. A duração da combustão utilizada também foi obtida a partir dos dados experimentais de cada combustível e da condição operacional. O cálculo do  $c_p$  do fluido de trabalho é realizado com equação única para a faixa de temperatura até 4000 K, diferentemente dos polinômios *NASA SP-273* (Gordon & McBride, 1971), que são aplicados à tabela termodinâmica da *JANNAF* em duas faixas distintas de temperatura. A contribuição da equação única reduz custos computacionais.

Nigro et al. (1999) mostram um modelo zero dimensional com taxa de queima pela lei de Wiebe e duas zonas. Outras características da modelagem são: modelo de equilíbrio químico; transferência de calor pelo modelo de Woschni e

propriedades termodinâmicas dos gases obtidas usando as tabelas *JANNAF*. Os resultados apresentados são apenas qualitativos o que impede a avaliação da precisão do modelo.

O programa comercial *BOOST*, da *AVL* (*AVL*, 2011) pode utilizar a modelagem da taxa de queima pela lei de Wiebe com uma ou duas zonas para ignição por centelha e a *double* Wiebe para aproximar as características da liberação de calor na ignição por compressão. Neste caso se especificam duas funções de Wiebe, uma para modelar o pico inicial de combustão pré-misturada e outra para a combustão difusiva.

### 2.2.2.2.

#### Velocidade de propagação de chama

Outra forma de representar a taxa de queima é a partir da modelagem da velocidade de propagação da chama turbulenta no interior câmara de combustão. No presente trabalho os termos interior da câmara de combustão e interior do cilindro por vezes são utilizados com o mesmo sentido, se referindo ao volume variável onde se processa a combustão. A velocidade de propagação de chama,  $V_{pch}$ , é a soma vetorial da velocidade de queima da mistura ar-combustível (reagentes ou mistura não queimada) com a velocidade do escoamento desta, conforme ilustrado na Figura 2.4.



Figura 2.4 – Esquema representativo da velocidade de propagação de chama.

Neste caso, a modelagem da câmara será no mínimo de duas zonas ou quase dimensional, pois existe a representação dos volumes queimado e não queimado. A vantagem desta abordagem em relação ao modelo da lei de Wiebe está na redução da dependência de parâmetros obtidos a partir de dados experimentais. A velocidade de propagação de chama turbulenta dependerá do combustível, da geometria e características do escoamento no interior da câmara de combustão. A

dependência com a geometria do motor e as características do escoamento normalmente são representadas por um único fator, chamado fator de turbulência. Por sua vez, a dependência com o combustível é caracterizada pela sua velocidade de queima laminar, função da pressão, temperatura e razão de equivalência dos gases não queimados. A capacidade de predição da modelagem aumenta, com certa independência da condição operacional. As dificuldades residem no conhecimento preciso do fator de turbulência e da velocidade de queima laminar do combustível em diferentes condições de pressão, temperatura e razão de equivalência da mistura não queimada.

Assim como na modelagem por taxa de queima definida, utilizando a lei de Wiebe, na modelagem a partir da velocidade de propagação de chama, a composição dos gases queimados no interior da câmara de combustão pode ser calculada pela combustão completa, condição de equilíbrio químico ou utilizando cinética química. Podem existir submodelos específicos para cálculo dos poluentes.

Um exemplo da utilização da representação da taxa de queima a partir da velocidade de propagação de chama encontra-se no programa comercial *BOOST*, da AVL (AVL, 2011), na opção de modelo fractal. O modelo fractal é empírico e não depende explicitamente da geometria do motor. A modelagem da câmara é de duas zonas, quase dimensional.

Na modelagem multidimensional, usualmente adota-se a representação da taxa de queima pela velocidade de propagação de chama. A câmara de combustão pode ser modelada em duas ou três dimensões, discretizada por um conjunto de pequenas células ou volumes. Neste caso, cada célula ou grupo de células do domínio apresenta um histórico diferente em relação à evolução de pressão, temperatura e razão de mistura dos gases não queimados. A queima em cada célula se inicia em momentos diferentes a partir de um critério para a ignição. Normalmente adota-se o limite para a ignição em torno de 1000 K, relacionado com a temperatura de autoignição da mistura. Cada célula poderá conter um percentual de mistura queimada e não queimada, calculada a partir da velocidade de propagação. A velocidade de propagação de chama após a ignição será diferenciada em cada célula e instante de tempo, de acordo com as condições de pressão, temperatura e razão de mistura reinantes, além das características do escoamento. Na modelagem multidimensional a câmara de combustão é

representada explicitamente e influencia a velocidade de propagação da chama através do escoamento em seu interior.

A velocidade de chama laminar é normalmente retirada de tabelas previamente construídas a partir de dados experimentais, modelos empíricos e modelos de cinética química, como função do combustível, temperatura, pressão e razão de equivalência da mistura não queimada. As tabelas são utilizadas para evitar o cálculo das velocidades em tempo real e reduzir os custos computacionais. Mesmo assim, os custos computacionais envolvidos neste tipo de modelagem multidimensional são bastante elevados.

O programa comercial *FIRE* da *AVL* (*AVL*, 2010) permite a modelagem bidimensional e tridimensional do motor com representação da taxa de liberação de calor a partir da velocidade de propagação de chama.

Seguindo Sodr e & Yates (1998) e Aguiar & Sodr e (2001), Barros (2003) adotou uma modelagem de combust o de duas zonas, intermedi aria entre a quase dimensional e a multidimensional. O objetivo foi levar em conta as caracter sticas geom tricas tridimensionais da c mara de combust o do motor, sem maiores impactos nos custos computacionais. Para tanto foi realizado um mapeamento pr vio de diversas posi es da frente de chama, assumida como esf rica, e do pist o, a partir da utiliza o de *CAD (Computer-Aided Drawing)* tridimensional. Realiza-se uma interpola o biparam trica no mapeamento de forma a se cobrir todas as posi es relativas poss veis entre a frente de chama (raio de chama) e o pist o do motor. O raio de chama   definido como a dist ncia da frente de chama em rela o ao ponto de igni o.

Foi adotado um modelo de onda (escoamento compress vel) de combust o em contornos fechados. A velocidade de frente de chama   calculada pela equa o de conserva o de quantidade de movimento linear, controlada pela cin tica qu mica e pelo n vel de turbul ncia do escoamento. A modelagem tridimensional da c mara de combust o fornece as informa es dimensionais ( reas e volumes) da frente de chama e das zonas de g s queimado e n o queimado necess rias ao modelo de combust o. A grande vantagem deste modelo   permitir avaliar qualquer tipo de c mara de combust o, por mais complexa que seja, al m de avaliar a influ ncia da posi o da vela na propaga o da frente de chama. Permite uma flexibilidade maior em rela o   condi o operacional e tipo de motor ao embutir sua geometria. Permite uma previs o de in cio de detona o, a partir de

cálculo mais preciso da temperatura dos gases não queimados, podendo-se utilizar o limite de autoignição para predição.

### **2.3. Velocidades de chama**

Pode-se classificar os tipos de combustão e suas respectivas chamas em pré-misturadas e difusivas. Na combustão pré-misturada, combustível e oxidante são previamente misturados e a chama é a interface entre a região dos reagentes e a região dos produtos de combustão. A taxa de queima é governada pela reação química de oxidação dos reagentes em produtos de combustão. Este regime é típico dos motores de combustão do ciclo Otto (ignição por centelha). Por sua vez, na combustão difusiva, combustível e oxidante não são previamente misturados e a chama difusiva é a interface entre a região do combustível e a região do oxidante. No caso de combustíveis líquidos, a taxa de queima é governada pela evaporação do combustível. Este regime de combustão é típico na combustão de gotas em motores de ignição por compressão (ciclo Diesel).

As chamas laminares pré-misturadas, frequentemente em conjunto com chamas de difusão, têm aplicações em muitos dispositivos e processos residenciais, comerciais e industriais. O entendimento das chamas laminares é pré-requisito necessário para o estudo de chamas turbulentas, sendo que muitas teorias de chamas turbulentas são baseadas na estrutura da chama laminar. De uma forma geral, a chama pode ser definida como uma zona localizada de combustão autossustentada que se propaga com velocidade subsônica. Esta onda de combustão com velocidade subsônica também é chamada de deflagração, em contraste com o termo detonação, utilizado para ondas de combustão que se propagam a velocidades supersônicas. A diferença para o estabelecimento entre deflagração e detonação é a taxa de energia de ignição cedida à mistura (Turns, 2000). Cabe ressaltar que o termo detonação empregado na teoria de motores de combustão interna difere conceitualmente do termo detonação utilizado na teoria de combustão. Na teoria de motores, detonação, tradução inadequada do termo em inglês *knocking* (batida), se refere à interação de duas ou mais ondas de deflagração, que eventualmente pode atingir velocidade supersônica, sendo altamente prejudicial ao motor quando ocorre de forma intensa e continuada.

Desta forma, as ondas de combustão, originadas a partir da vela de ignição e em alguma outra região da câmara, são subsônicas e sua interação com velocidade supersônica é que produz o fenômeno *knocking*, com ruído característico de “batida de pino”. Entretanto, devido à sua extensa aceitação e utilização na literatura da área, neste trabalho também será utilizado o termo detonação em referência à ocorrência de *knocking*.

O foco do presente trabalho reside no estudo de combustíveis para motores de ignição por centelha, de tal forma que nas seções subsequentes serão abordadas as velocidades de chama pré-misturadas subsônicas (deflagração) laminares e turbulentas. A velocidade de chama também é denominada velocidade de queima, de tal forma que estes termos podem ser utilizados como sinônimos e com conceito diferente do termo velocidade de propagação de chama. Conforme dito anteriormente, a velocidade de propagação de chama é a soma vetorial da velocidade de queima com a velocidade do escoamento. Assim, em uma chama estacionária (velocidade de propagação de chama nula), para um referencial inercial, a velocidade de queima (ou de chama) é igual e oposta à velocidade do escoamento (mistura não queimada) (ver Figura 2.4).

### 2.3.1. Velocidades de chama laminares

Para o estudo das velocidades de chama laminares costuma-se fixar o sistema de coordenadas na onda de combustão que se propaga, de tal forma que o observador na chama vê a mistura não queimada se aproximando com a velocidade de chama. O processo é equivalente a uma chama plana estabilizada em um queimador. Assume-se chama unidimensional e a velocidade de chama considerada é normal à região de reação, dada pela eq. (2.2),

$$S_L = \frac{\dot{m}_{ub}}{\rho_{ub}A} \quad (2.2)$$

onde  $S_L$  é a velocidade de chama laminar,  $\dot{m}_{ub}$  é a vazão mássica de mistura não queimada (reagentes) que cruza a frente de chama,  $\rho_{ub}$  é a massa específica da mistura não queimada e  $A$  é a área da frente de chama (Turns, 2000). As velocidades de chama laminares são propriedades físico-químicas dos

combustíveis, que variam de combustível para combustível, sendo também função da temperatura, pressão e razão de equivalência da mistura combustível e oxidante. Podem ser determinadas por alguns experimentos controlados em equipamentos tais como queimadores abertos (bico de Bunsen, queimadores planos e queimadores opostos, também chamados de duplos em contracorrente), câmaras de volume constante, reatores tubulares, entre outros.

Teoricamente, a velocidade de chama laminar descreve a evolução da chama plana pré-misturada, unidimensional, adiabática em domínio infinito, e está associada à taxa de liberação de energia do combustível. Contém informações de difusividade, reatividade e características exotérmicas de uma dada mistura (Davis et al., 1996). Seu conhecimento constitui informação importante para o projeto de equipamentos de combustão, entendimento da química de combustão, validação de modelos, seleção de formulações reduzidas, etc. A velocidade de chama laminar, juntamente com outras características, é fundamental para validação de mecanismos de cinética química, que descrevem como o processo da combustão ocorre, desde a ignição e desenvolvimento da queima, até sua extinção, determinando os produtos de combustão.

Com relação à interação entre o motor de combustão interna e seu combustível, o conhecimento da velocidade de queima laminar é a base para obtenção da velocidade de propagação de chama no interior da câmara de combustão, que apresenta características turbulentas. Esta informação pode ser muito útil na simulação, projeto e otimização do desempenho e emissões de motores utilizando diferentes combustíveis.

Devido à complexidade do fenômeno de combustão, existem dificuldades de controle e padronização nos experimentos básicos de determinação das velocidades de chama laminares, incluindo metodologias de correções. Estes controles buscam garantir, entre outras, as condições completamente laminares, isoladas de fenômenos secundários. Desta forma, existem limitados dados experimentais de velocidades de queima laminares para componentes puros de combustíveis, suas misturas e combustíveis comerciais constituídos por muitos componentes, como a gasolina. Não foi ainda estabelecido um método padrão para medição das velocidades de chama. Os dados experimentais são ainda mais escassos nas condições de elevadas temperaturas e pressões típicas dos equipamentos de combustão.

Não existem regras bem definidas com relação à composição da velocidade de chama laminar de misturas de combustíveis a partir de seus componentes, com casos lineares e não lineares, baseados nas concentrações volumétricas ou mássicas (Spalding, 1956; Yumlu, 1967; Bradley et al., 1991; Hirasawa et al., 2002; Broustail et al., 2011; Van Lipzig et al., 2011). Assim, não são conhecidas em detalhes as possíveis influências sinérgicas ou antagônicas dos diferentes combustíveis em mistura.

A maior parte dos dados de velocidades de chama laminares está disponível para as condições padrão de temperatura e pressão (298 K, 101325 Pa), devido à conveniência de realização dos experimentos e para comparação de dados de diferentes laboratórios e metodologias. Existem correlações empíricas para correção das velocidades de queima laminares medidas em outras temperaturas e pressões para a condição padrão, que variam de combustível para combustível e também são funções da razão de equivalência da mistura ar-combustível (Turns, 2000; Heywood, 1988; Gülder, 1984; Metghalchi & Keck, 1982).

Como os mecanismos de reação química de diferentes combustíveis dependem dos dados experimentais de velocidades de chama laminares para sua validação, estes não são capazes atualmente de calcular com precisão as velocidades, existindo muitas incertezas nos seus resultados para diferentes condições de queima.

A seguir são apresentadas algumas referências de trabalhos sobre velocidades de chama laminares para diferentes componentes puros e misturas.

Metghalchi & Keck (1982) estudaram a influência da temperatura, pressão, razão de equivalência e do combustível na velocidade de chama laminar. Determinaram experimentalmente as velocidades de chama laminares para várias misturas ar-combustível, utilizando metanol, iso-octano e gasolina, sobre uma faixa de temperatura e pressão típica de motores de combustão interna e combustores de turbinas a gás. Várias formas de correlações foram tentadas, sendo a mais útil expressa na eq. (2.3),

$$S_L = S_{L_0} \left( \frac{T_{ub}}{T_0} \right)^\alpha \left( \frac{P}{P_0} \right)^\beta (1 - 2,1 Y_{dil.}) \quad (2.3)$$

onde  $S_L$  é a velocidade de chama laminar na temperatura e pressão da mistura não queimada,  $S_{L_0}$  é a velocidade de chama laminar na condição de referência ( $T_0 = 298$  K e  $P_0 = 101325$  Pa),  $T_{ub}$  é a temperatura da mistura não queimada e  $Y_{dil.}$  é a fração mássica de diluente presente na mistura, incluído na equação para levar em conta a presença de gases residuais dos produtos de combustão. A faixa de temperatura da mistura não queimada para validade da equação foi reportada como  $T_{ub} \geq 350$  K. Também foram fornecidas as eqs. (2.4), (2.5) e (2.6), respectivamente para o cálculo das velocidades laminares na condição de referência e dos expoentes de temperatura e pressão, como funções da razão de equivalência da mistura,

$$S_{L_0} = B_M + B_2(\phi - \phi_M)^2 \quad (2.4)$$

$$\alpha = 2,18 - 0,8(\phi - 1) \quad (2.5)$$

$$\beta = -0,16 + 0,22(\phi - 1) \quad (2.6)$$

A eq. (2.4) para o cálculo da velocidade de chama laminar de referência apresenta os parâmetros  $B_M$ ,  $B_2$  e  $\phi_M$ , que dependem do combustível, e são apresentados para alguns componentes puros.  $\phi$  é a razão de equivalência da mistura,  $\phi_M$  é a razão de equivalência em que  $S_{L_0}$  assume seu valor máximo,  $B_M$ . Turns (2000) também reporta as relações obtidas por Metghalchi & Keck (1982).

Gülder (1984) destacou a importância do conhecimento das velocidades de chama laminares em diferentes pressões, temperaturas e razões de equivalência para se estimar as velocidades turbulentas nas simulações de motores de ignição por centelha. Velocidades laminares obtidas por diferentes pesquisadores e fórmulas empíricas e semiempíricas de dependência com a pressão, temperatura e razão de equivalência foram comparadas e analisadas. Os combustíveis considerados incluíram o etanol, misturas de etanol e água, metanol, iso-octano, misturas de iso-octano e etanol e propano. Os dados experimentais de velocidades obtidos pelo autor e outros pesquisadores, juntamente com predições baseadas em modelos teóricos de termoquímica, foram utilizados para desenvolver correlações empíricas das velocidades de chama laminares em função da pressão, temperatura,

razão de equivalência e fração mássica de diluentes. A expressão desenvolvida para a velocidade de chama apresenta dependência de lei de potência com a temperatura e pressão, assumindo forma semelhante à apresentada por Metghalchi & Keck (1982), sendo expressa pela eq. (2.7),

$$S_L = S_{L_0} \left( \frac{T_{ub}}{T_0} \right)^\alpha \left( \frac{P}{P_0} \right)^\beta (1 - fF) \quad (2.7)$$

onde  $S_{L_0}$  é a velocidade de chama laminar na condição de referência ( $T_0 = 300$  K e  $P = 100000$  Pa). O último fator refere-se à correção devido à presença dos diluentes inertes, com  $F$  sendo a fração molar do diluente e  $f = 2,3$ . São propostos expoentes de dependência com a temperatura e pressão para os diferentes combustíveis avaliados. Por sua vez,  $S_{L_0}$  é dado pela eq. (2.8),

$$S_{L_0} = ZW\phi^n \exp[-\xi(\phi - 1,075)^2] \quad (2.8)$$

onde os valores dos coeficientes  $Z$ ,  $W$ ,  $n$  e  $\xi$  foram fornecidos para os diferentes combustíveis avaliados.

Sharma & Mohan (1984) e Turns (2000), a partir de considerações teóricas e correlações empíricas da literatura, reportam expoentes positivos para dependência da velocidade de chama laminar com a temperatura e expoentes negativos para dependência da velocidade de chama laminar com a pressão. Para a temperatura, a dependência com expoente dois ou próximo de dois aparece com frequência.

Kuo (2005) também apresenta expoentes típicos para dependência da velocidade de chama laminar com a temperatura e pressão, baseado no trabalho de Metghalchi & Keck (1982), para a eq. (2.3) sem o termo referente ao diluente. Os expoentes, reproduzidos na Tabela 2.1, foram obtidos por ajustes empíricos a dados de velocidades de chama laminares em câmara de volume constante, para diferentes combustíveis e razões de equivalência. Nota-se a dependência com expoentes negativos para a pressão e com expoentes próximos de dois para a temperatura.

Tabela 2.1 – Expoentes de dependência da velocidade de chama laminar com a temperatura e pressão (reproduzido de Kuo, 2005).

Combustível	Expoentes de dependência da velocidade de chama laminar					
	Temperatura, $\alpha$			Pressão, $\beta$		
	$\phi = 0,8$	$\phi = 1,0$	$\phi = 1,2$	$\phi = 0,8$	$\phi = 1,0$	$\phi = 1,2$
Metanol	2,47	2,11	1,98	-0,21	-0,13	-0,11
Propano	2,27	2,13	2,06	-0,23	-0,17	-0,17
Iso-octano	2,36	2,26	2,03	-0,22	-0,18	-0,11
RMFD-303*	2,27	2,19	2,02	-0,17	-0,13	-0,087

\*Gasolina sintética (45% tolueno, 14% undeceno e 41% iso-octano).

Heywood (1988) apresenta a eq. (2.3), sem o último termo entre parênteses do lado direito, referente ao fator de diluição, para caracterizar a dependência da velocidade de chama laminar com a temperatura e pressão na modelagem de motores de ignição por centelha. Reporta relações propostas por Rhodes (1985) para encontrar os expoentes de dependência da velocidade de chama laminar com a temperatura e pressão, para uma gasolina com massa molecular média de 107 e relação H/C de 1,69. As relações, funções da razão de equivalência da mistura, são dadas pelas eqs. (2.9) e (2.10),

$$\alpha_g = 2,4 - 0,271\phi^{3,51} \quad (2.9)$$

$$\beta_g = -0,357 + 0,14\phi^{2,77} \quad (2.10)$$

Para razões de equivalências estequiométrica (1,0) e rica (1,11), típicas da faixa de operação dos motores de ignição por centelha, os expoentes,  $\alpha_g$  e  $\beta_g$ , assumem, respectivamente, valores próximos a 2 e -0,2.

Davis et al. (1996) determinaram experimentalmente as velocidades de queima laminares para o benzeno e tolueno em misturas com o ar, utilizando a técnica de queimadores opostos (Wu & Law, 1984; Zhu et al., 1989; Egolfopoulos et al., 1989). Basicamente, a técnica envolve o estabelecimento de duas chamas planas simétricas, quase adiabáticas, em contracorrente, geradas a partir de dois queimadores tubulares abertos. Determina-se o perfil axial de velocidades a partir da linha de centro do fluxo por *LDV* (*Laser Doppler Velocimetry*). O ponto de mínimo do perfil de velocidades é identificado como a velocidade de chama de referência, enquanto o gradiente de velocidade à frente deste ponto caracteriza

uma taxa de estiramento de chama, que deve ser compensado para estiramento zero na determinação da velocidade final do experimento. Os experimentos foram realizados à temperatura ambiente e pressão atmosférica, com razões de equivalência de 0,8 a 1,4 para as misturas benzeno-ar e de 0,8 a 1,3 para as misturas tolueno-ar. Os efeitos de estiramento de chama foram corrigidos através de extrapolações lineares e não lineares. As velocidades encontradas para o tolueno foram de 5 a 6 cm/s mais baixas que as do benzeno na faixa de razões de equivalência avaliadas. As velocidades corrigidas por extrapolações lineares se mostraram em média cerca de 2 cm/s mais baixas que as corrigidas por extrapolações não lineares, evidenciando a necessidade de maiores experimentos para se explorar o conceito teórico de comportamento não linear.

Os resultados de velocidades para o benzeno, extrapolados linearmente, foram comparados com os resultados de Gibbs & Calcote (1959), obtidos em bico de Bunsen, apresentando concordância nas misturas ricas, porém sendo sistematicamente menores nas misturas pobres e próximo da estequiometria. Os autores atribuíram as maiores velocidades encontradas por Gibbs & Calcote (1959) ao efeito pronunciado de estiramento de chama associado com a difusão não uniforme nas chamas de Bunsen. Segundo os autores, para as misturas mais ricas, o número de Lewis próximo da unidade suprime o efeito do estiramento de chama, o que explica a concordância dos resultados para estas misturas. Fica evidenciada a importância da correção do efeito de estiramento de chama na determinação das velocidades laminares de chama (Law, 1988). As velocidades extrapoladas linearmente foram comparadas com as velocidades previstas por dois mecanismos de cinética química existentes (Emdee et al., 1992; Lindstedt, 1994), sendo sistematicamente superiores, o que evidenciou a necessidade de novos desenvolvimentos. Modificações em um dos mecanismos foram propostas, com ajustes nas constantes das taxas de reações de maior sensibilidade, que melhoraram significativamente as previsões. Foram sugeridos maiores estudos experimentais e teóricos sobre as reações envolvendo o fenol e possivelmente o ciclopentadieno para se desenvolver um mecanismo mais robusto para benzeno e tolueno.

Davis & Law (1998a) relatam a escassez de dados de velocidades de chama laminares para o iso-octano e n-heptano, limitados em grande parte a estudos da década de 1950 (Gerstain et al., 1951; Heimel & Weast, 1956; Gibbs & Calcote,

1959). Dando continuidade aos estudos, Davis & Law (1998a) determinaram experimentalmente as velocidades de chama laminares do iso-octano e n-heptano em misturas com o ar à temperatura ambiente e pressão atmosférica, utilizando a mesma técnica com queimadores opostos. As razões de equivalência adotadas foram de 0,7 a 1,7. O efeito de estiramento de chama foi corrigido tanto por extrapolação linear como não linear, sendo que os valores encontrados pela extrapolação não linear foram tipicamente 2 cm/s mais baixos do que pela linear. Os autores sugerem que, devido às incertezas típicas de 2 cm/s na determinação das velocidades de chama, ambas as técnicas de extrapolação poderiam ser adotadas na predição das velocidades. As velocidades obtidas para o n-heptano foram maiores que as do iso-octano sobre toda a faixa de razões de equivalência, com diferenças em torno de 4 cm/s para misturas pobres, atingindo um máximo de 5 cm/s próximo do estequiométrico e decrescendo novamente para cerca de 2 cm/s nas misturas muito ricas. Os resultados foram considerados mais precisos que os obtidos por Gibbs & Calcote (1959) e Heimel & Weast (1956) utilizando a técnica de bico de Bunsen, e também que os resultados de Gerstein et al. (1951) utilizando um reator tubular. As diferenças foram atribuídas aos efeitos de parede, incluindo perda de calor nos dados de Gerstein et al. (1951) com o reator tubular, além dos efeitos de estiramento de chama e difusão não uniforme, também presentes nos experimentos com bico de Bunsen de Gibbs & Calcote (1959) e Heimel & Weast (1956).

Os autores evidenciam a necessidade do desenvolvimento de mecanismos de cinética reduzidos, de menor custo computacional, para utilização em aplicações práticas. Com o intuito de desenvolver mecanismos cinéticos apropriados para iso-octano e n-heptano, os autores combinam o modelo cinético compacto para o n-heptano, desenvolvido por Held (1997) com os mecanismos relevantes de alta temperatura do modelo de Curran et al. (1998) para o iso-octano (ver Davis & Law, 1998b). Seus resultados experimentais são comparados às predições do modelo reduzido com boa concordância para ambos os combustíveis na faixa pobre de razões de equivalência. As predições apresentaram velocidades mais baixas para as misturas estequiométricas e ricas. Baseados em análise de sensibilidade das reações químicas envolvidas, os autores sugerem novos desenvolvimentos teóricos e experimentais para a cinética de oxidação do propeno

e iso-buteno, no sentido de melhorar as previsões de velocidades para ambos, n-heptano e iso-octano.

Egolfopoulos et al. (1992) realizaram estudo experimental e numérico sobre a cinética de oxidação do etanol. As velocidades de chama laminares de misturas de etanol-ar foram determinadas experimentalmente utilizando a técnica de queimadores opostos, a uma atmosfera, temperaturas iniciais entre 363 e 453 K e extensa faixa de razões de equivalência. Os resultados também foram extrapolados para 298 K. Um esquema cinético detalhado foi subsequentemente compilado, acrescentando informações da cinética do etanol em mecanismo anterior desenvolvido para o metanol. O modelo desenvolvido se mostrou consistente ao prever não somente os resultados de velocidades de chama experimentais do etanol, mas também do metano, metanol e hidrocarbonetos  $C_2$ . Reconhecendo que a previsão da velocidade de chama não é suficiente para validação completa do mecanismo, o esquema também foi comparado com dados experimentais de literatura sobre o perfil de espécies químicas e temperatura em reatores tubulares, e dados de atraso de ignição em tubo de choque. Os estudos demonstraram a importância da cinética dos radicais  $\cdot CH_3$  e  $HO_2 \cdot$ , sugerindo que a taxa da reação  $\cdot CH_3 + HO_2 \cdot \rightarrow CH_3O \cdot + \cdot OH$  poderia ser mais lenta, enquanto que a taxa da reação  $\cdot CH_3 + HO_2 \cdot \rightarrow CH_4 + O_2$  poderia ser mais rápida do que os valores frequentemente utilizados na literatura. Também são sugeridas pesquisas mais aprofundadas em vários aspectos da cinética química, incluindo os passos de reações de ramificações e pirólises.

Farrell et al. (2004) investigaram a velocidade de chama laminar de 45 hidrocarbonetos, incluindo oxigenados, em combustor tipo câmara de volume constante. As misturas foram ignitadas no centro do vaso esférico à temperatura inicial de 450 K e pressão de 304 kPa, cobrindo razões de equivalência de 0,55 a 1,4. A velocidade de chama foi determinada a partir de uma análise termodinâmica dos dados de pressão no tempo, assumindo, entre outras considerações: pressão uniforme no vaso em cada instante; gases na câmara consistindo de uma fração queimada,  $X_b$ , em equilíbrio químico e termodinâmico local e uma fração não queimada,  $(1 - X_b)$ , em equilíbrio termodinâmico local, porém composição química fixa; frente de chama esférica; compressão isentrópica dos gases à frente da chama; ausência de transferência de calor entre as frações queimada e não queimada; efeito de estiramento de chama desprezível.

Os principais resultados encontrados foram: 1 - Entre os alcanos estudados o metano apresentou a menor velocidade de chama e o etano a mais elevada; 2 – Os normais alcanos (n-alcanos) são mais rápidos que os iso-alcanos; 3 – Velocidades semelhantes foram obtidas para n-alcanos C<sub>4</sub> e superiores; 4 – Cicloalcanos (ciclopentano e ciclohexano) apresentaram velocidades comparáveis aos alcanos lineares; 5 – A substituição por radicais metil reduz a velocidade de chama dos cicloalcanos; 6 – Os alcenos são mais rápidos que os correspondentes alcanos; 7 – Moléculas com elevado grau de insaturação (alcinos) apresentaram velocidades de chama superiores aos alcenos, alcanos e aromáticos estudados (exceção do etileno); 8 – Os efeitos de ciclização e ramificação sobre as velocidades dos alcenos são os mesmos aos verificados para os alcanos; 9 – Existe um maior benefício sobre a velocidade de chama (18%) da ligação tripla terminal em relação à ligação tripla interna nos alcinos. Nos alcenos, o benefício da ligação dupla terminal sobre a interna é menor (~4,8%); 10 – A base cinética para as diferenças de velocidades entre alcenos e alcanos pode ser relacionada com a extensão dos caminhos de produção de átomos de hidrogênio, que conduzem a uma velocidade mais elevada (alcenos) em comparação com a produção de radicais metil, que reduzem a velocidade (alcanos); 11 – Os aromáticos apresentam grande variação de velocidades de queima, sendo o benzeno mais rápido que os aromáticos substituídos (ramificados); 12 – As menores velocidades dos benzeno substituídos foram atribuídas à formação de intermediários benzílicos que, por serem mais estáveis, apresentam menores taxas de reação; 13 – As maiores velocidades para o etil, i/n propil e t-butilbenzeno em comparação com o tolueno foram qualitativamente relacionadas com a decomposição dos radicais benzílicos que geram átomos de hidrogênio, levando a um aumento da taxa das ramificações em cadeia; 14 – Orto (O) e Para (P) xileno e trimetilbenzeno exibem maiores velocidades que o correspondente isômero Meta (M). A presença de caminhos de liberação de átomos de hidrogênio com os isômeros O e P pode explicar o fenômeno; 15 – Os dados limitados de velocidades dos oxigenados mostraram velocidades maiores que os correspondentes hidrocarbonetos não oxigenados.

Os autores sugerem que os dados e análises apresentadas no trabalho constituem base fundamental para relacionar o efeito da estrutura do combustível sobre eficiência de combustão e emissões, porém indicam que a extensão da

influência dos átomos de hidrogênio gerados durante a decomposição inicial do combustível deve ser confirmada via modelamento cinético detalhado.

Van Lipzig (2011) realizou medições experimentais de velocidades de queima laminares adiabáticas para o n-heptano, iso-octano, etanol e suas misturas binárias, com 50% em volume de cada componente. Também fez medições com mistura terciária, usando 1/3 em volume para cada componente. Os experimentos foram realizados à pressão atmosférica, com temperaturas de 298 K e 338 K, utilizando um queimador planar com a metodologia do fluxo de calor (De Goeij, 1993; Konnov, 2011), na condição em que a perda líquida de calor para o queimador é zero (chama quase adiabática). A faixa de razões de equivalência avaliada foi de 0,6 a 1,5, sendo que em alguns casos as misturas mais ricas não foram consideradas devido às dificuldades para evaporação total do combustível. Os resultados das velocidades dos componentes puros foram comparados com resultados obtidos por outras técnicas (Gülder, 1982; Egolpoulos et al., 1992; Davis & Law, 1998a; Kwon et al., 2000; Huang et al., 2004; Kumar et al., 2007; Bradley et al., 2009; Chong & Hochgreb, 2011; Kelley et al., 2011), em geral apresentando boa concordância em termos de tendências gerais. O etanol apresentou as maiores velocidades, enquanto o iso-octano apresentou as menores velocidades. Na Figura 2.5, adaptada de Van Lipzig (2011), é ilustrada a dependência das velocidades de chama laminares com a razão de equivalência da mistura. Fica também evidenciada a ordem de grandeza do grau de incerteza da metodologia adotada por Van Lipzig (2011) e entre os dados de velocidades obtidos por técnicas diferentes, que pode atingir cerca de 20% na região próxima de  $\phi = 1,0$ .

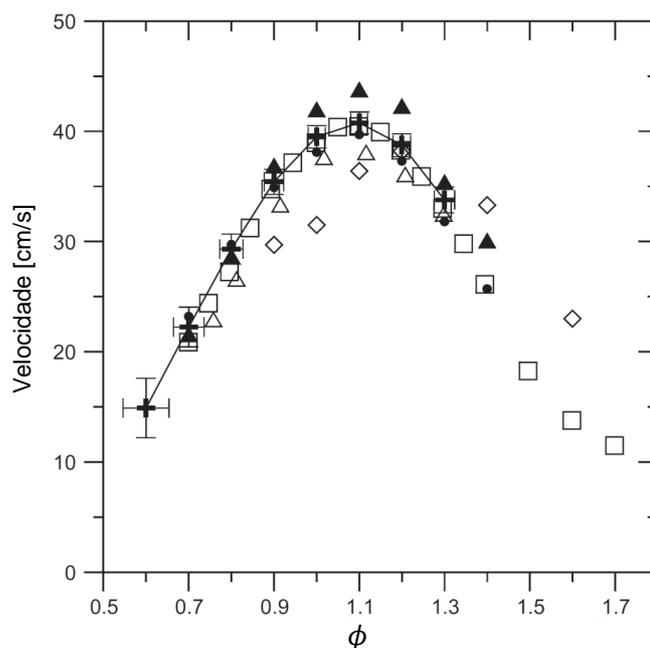


Figura 2.5 – Velocidades de chama laminar de n-heptano em ar (pressão atmosférica, 298 K). Cruzes: Van Lipzig et al. (2011); triângulos abertos: Chong & Hochgreb (2011); quadrados: Davis & Law (1998a); triângulos sólidos: Kumar et al. (2007); diamantes abertos: Kwon et al. (2000); círculos sólidos: Huang et al. (2004) (adaptado de Van Lipzig et al., 2011).

Com relação aos resultados obtidos para as misturas binárias e terciárias dos componentes, as comparações foram realizadas com os resultados obtidos para os componentes puros. Os autores relatam a inexistência de outros dados experimentais com outras técnicas de medição para realização de comparações. As misturas apresentaram sempre valores de velocidades intermediários aos dos componentes puros. Para a mistura de n-heptano e iso-octano, sua velocidade de queima laminar foi aproximadamente a média entre as velocidades dos componentes puros em toda a faixa de razões de equivalência utilizadas, conforme pode ser visto na Figura 2.6. Já as misturas de etanol com n-heptano e etanol com iso-octano apresentaram comportamento não linear em relação aos componentes puros. A hierarquia foi sempre mantida. A mistura terciária apresentou valores intermediários aos dos componentes puros. Os autores relatam a importância na obtenção de dados sistemáticos de velocidades de queima laminar de misturas de componentes para o desenvolvimento de regras de mistura empíricas e validação de modelos cinéticos.

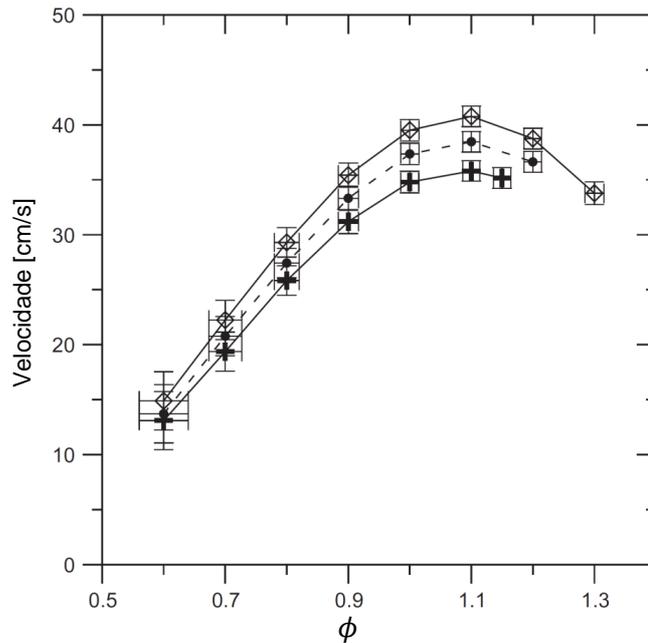


Figura 2.6 – Velocidades de chama laminares do n-heptano, iso-octano e sua mistura binária (50% v/v) em ar (pressão atmosférica, 298 K). Cruzeiros: iso-octano em ar; diamantes: n-heptano em ar; círculos: mistura de n-heptano e iso-octano (50% v/v) em ar (adaptado de Van Lipzig et al., 2011).

Conforme foi apresentado, as velocidades laminares são propriedades das misturas combustíveis e suas condições de queima. Nos motores de combustão interna o regime turbulento é a condição reinante, contudo as velocidades de chama laminares são necessárias ao cálculo das velocidades de chama turbulentas, apresentadas na próxima seção.

### 2.3.2. Velocidades de chama turbulentas

As chamas pré-misturadas turbulentas são de grande importância prática, sendo encontradas em vários equipamentos, tais como motores de foguete, motores de combustão interna de ignição por centelha, turbinas a gás, dispositivos de soldagem, queimadores industriais, entre outros. Entretanto, sua descrição teórica é ainda matéria de incertezas e mesmo controvérsias, não havendo uma teoria abrangente que seja de aceitação geral (Turns, 2000).

O motor de combustão interna de ignição por centelha talvez seja o exemplo mais difundido de combustão pré-misturada. Apesar do combustível, na maioria dos casos, ser introduzido na fase líquida no coletor de admissão, há tempo suficiente para sua evaporação e mistura completa com o ar antes da ignição pela

vela. A duração da combustão, importante parâmetro na operação dos motores, é controlada pela velocidade de chama turbulenta e distribuição do volume de combustão, relacionado com a velocidade de propagação da chama. A duração de combustão governa, por exemplo, o limite pobre de operação estável do motor, tolerância para recirculação dos gases de escape, eficiência térmica e emissões de  $\text{NO}_x$ .

Diferentemente das chamas laminares, cujas velocidades dependem somente das propriedades físico-químicas da mistura combustível-oxidante, as chamas turbulentas apresentam velocidades dependentes das características do escoamento e das propriedades da mistura. Analogamente às chamas laminares, define-se a velocidade de chama turbulenta para um observador viajando com a chama como a velocidade em que a mistura não queimada entra na região da chama, pela direção normal. Nesta definição assume-se que a superfície da chama seja representada por uma quantidade média no tempo, reconhecendo que a posição instantânea da região de reação pode estar flutuando significativamente. Como a medição das velocidades do gás não queimado, em um ponto próximo à chama turbulenta é extremamente difícil, na melhor das hipóteses as velocidades são estimadas a partir de medições de vazão mássica dos reagentes. Assim a velocidade de chama turbulenta pode ser expressa pela eq. (2.11),

$$S_T = \frac{\dot{m}_{ub}}{\rho_{ub}\bar{A}} \quad (2.11)$$

onde  $S_T$  é a velocidade média de chama turbulenta,  $\dot{m}_{ub}$  é a vazão mássica de mistura não queimada (reagentes) que cruza a frente de chama,  $\rho_{ub}$  é a massa específica da mistura não queimada e  $\bar{A}$  é uma média temporal e/ou espacial da área da chama. A dificuldade associada à determinação de uma área média para a chama resulta em considerável incerteza nas medições de velocidades de chama turbulentas.

As chamas turbulentas pré-misturadas são classificadas em três regimes: 1 – Regime de chama plissada; 2 – Regime de flameletes; 3 – Regime de combustão distribuída. Os regimes de chamas turbulentas são influenciados por cinco parâmetros adimensionais:  $l_k/\delta_L$ ;  $l_0/\delta_L$ ;  $Re_{l_0}$ ;  $Da$  e  $u'_{rms}/S_L$ , onde  $l_k$  e  $l_0$  são respectivamente a menor escala de turbulência (escala de Kolmogorov) e a maior

escala de turbulência (escala integral).  $\delta_L$  é a espessura da chama laminar,  $Re_{l_0}$  é o número de Reynolds de turbulência referente à escala integral,  $Da$  é o número de Damköhler (razão entre tempo característico do escoamento e tempo químico característico),  $u'_{rms}$  é a média quadrática de flutuação da velocidade do escoamento e  $S_L$  é a velocidade de chama laminar (Turns, 2000).

A partir de suas definições fundamentais, os cinco parâmetros adimensionais podem ser interrelacionados, sendo uma das formas de visualização desta relação apresentada na Figura 2.7,

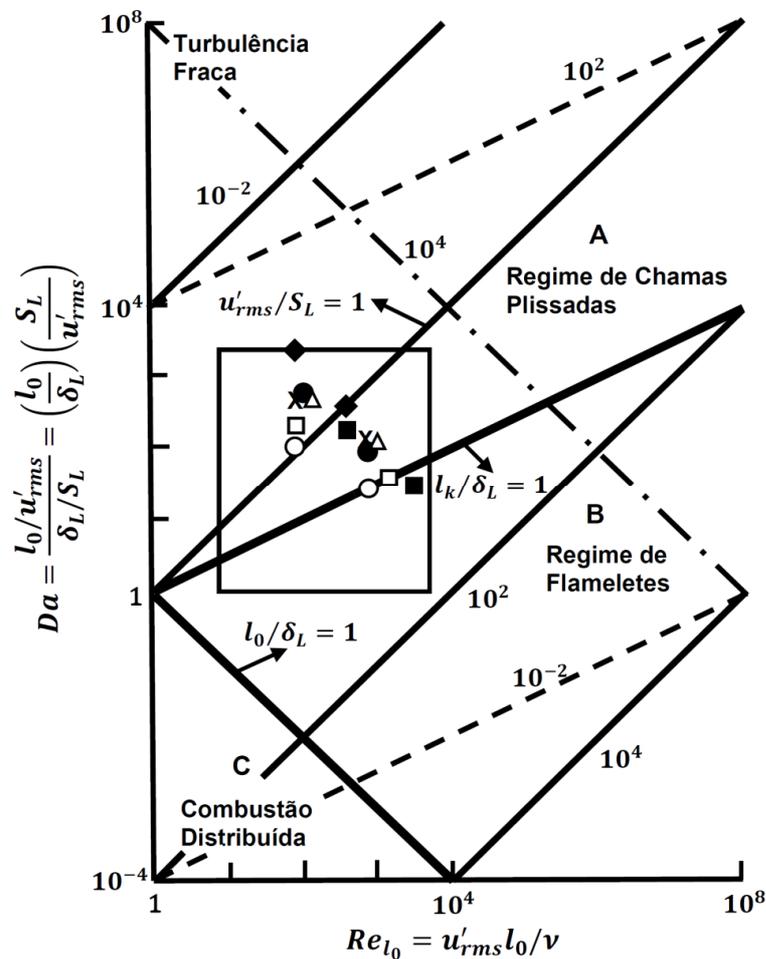


Figura 2.7 – Regimes de chamas turbulentas (adaptado de Turns, 2000).

A Figura 2.7 ilustra os diferentes regimes de combustão. A linha central em negrito corresponde a  $l_k/\delta_L = 1$ . Na região acima desta linha, onde  $l_k \geq \delta_L$ , o comprimento dos menores vórtices é maior que a espessura da chama, o que leva a deformação da frente de chama, no regime de chamas plissadas. Este critério para determinação da existência de chamas plissadas é algumas vezes chamado de

critério de Williams-Klimov (Williams, 1986). No outro extremo, quando os vórtices se tornam muito pequenos em relação à frente de chama, de tal forma que o comprimento dos maiores vórtices é menor que a espessura da chama ( $l_0 \leq \delta_L$ ) ocorre o regime de combustão distribuída (reator homogêneo), onde a queima se processa simultaneamente em todo o volume da mistura. Na Figura 2.7 esta região situa-se abaixo da linha  $l_0/\delta_L = 1$ . Este critério para o estabelecimento do regime de combustão distribuída é algumas vezes referido como critério de Damköhler (Abraham et al., 1985). Na região delimitada pelas linhas  $l_k/\delta_L = 1$  e  $l_0/\delta_L = 1$ , os grandes vórtices são maiores que a espessura da chama, porém os pequenos vórtices são menores que a espessura de chama, provocando a ruptura da frente de chama em pequenos pacotes de gás não queimado chamados de flameletes.

A área retangular delimitada na Figura 2.7, incluindo símbolos de dados experimentais, representa uma estimativa do domínio associado à combustão nos motores de ignição por centelha (Abraham et al., 1985), que pode estar no regime de chamas plissadas ou de flameletes, dependendo do motor e condição operacional.

No fenômeno da detonação (batida de pino ou *knocking*) em motores de ignição por centelha, o regime de combustão típico é o de combustão distribuída. Este também é o regime que representa o início de queima nos motores de ignição por compressão.

Na literatura existem diversas expressões que relacionam a velocidade de queima turbulenta com a velocidade de chama laminar, a partir de parâmetros de turbulência do escoamento, características geométricas do domínio e características da chama laminar. Algumas dessas correlações refletem apenas uma correção de área de queima da chama, para transformar a velocidade de chama laminar em velocidade de chama turbulenta. Outras, normalmente relacionadas ao comportamento de queima no interior de equipamentos, embutem as características do escoamento, refletindo a correção da velocidade de chama laminar para a velocidade de propagação de chama turbulenta (soma vetorial da velocidade de chama turbulenta com a velocidade do escoamento). Algumas correlações apresentadas não explicitam de forma clara sua abrangência e muitas vezes possuem aplicação limitada às características do experimento realizado ou equipamento adotado. Quando a referência descrita não explicitou de forma clara se a velocidade em questão é a velocidade de chama turbulenta ou a de

propagação de chama turbulenta, será adotado o termo velocidade de queima turbulenta em sentido mais amplo. Costuma-se denominar o fator de correção da velocidade de chama laminar para a velocidade de queima turbulenta como fator de turbulência,  $F_T$ , definido como a razão entre a velocidade de queima turbulenta e a velocidade de chama laminar. Este termo é frequentemente adotado na área de modelagem de combustão em motores.

A seguir são apresentadas algumas expressões para a velocidade de queima turbulenta e fator de turbulência, encontradas na literatura de combustão e de motores de combustão interna.

Sharma & Mohan (1984) comentam que os parâmetros utilizados em correlações de velocidades de chama turbulentas por vários pesquisadores da literatura, são diferentes para casos diferentes. As correlações podem conter termos de dependência com os experimentos e equipamentos utilizados e / ou termos devidos à mistura química e turbulência. Também são comentados os resultados de Bollinger & Williams (1949), que reportaram velocidades de chama turbulentas, em queimador sob condições de queima similares, para 3 combustíveis diferentes, acetileno, etileno e propano. Foi obtida uma correlação empírica comum, dada pela eq. (2.12),

$$S_T = 0,18 S_L d^{0,26} Re^{0,24} \quad (2.12)$$

onde,  $d$ , é o diâmetro do queimador em cm e  $S_T$  é dado em cm/s. Ficou evidenciada a proporcionalidade da velocidade de chama turbulenta com a velocidade de chama laminar e sua dependência com número de Reynolds do escoamento. A dependência da velocidade de chama turbulenta com o número de Reynolds do escoamento também foi reportada em outras referências (Damköhler, 1947; Goldenberg & Pelevin, 1959; Ramos, 1989). Bollinger & Williams (1949) também observaram um perfil de velocidades de chama turbulentas na forma de sino em função da razão de equivalência, semelhante ao perfil das velocidades de chama laminares (Figura 2.5). O ponto de máximo das curvas se descolou levemente para o lado rico, porém não se alterando apreciavelmente com o número de Reynolds.

Sharma & Mohan (1984) também reportam resultados que propõem uma variação da velocidade de queima turbulenta com a temperatura elevada ao

expoente 1,5 para misturas gás-ar. Com relação à dependência de pressão, Sharma & Mohan (1984) reportam os trabalhos de Goldenberg & Pelevin (1959), que propõem uma proporcionalidade da velocidade de queima turbulenta com  $P^{0,5}$ . Sugerem que o fator que influencia a velocidade de queima turbulenta na mudança de pressão é a alteração de massa específica e, conseqüentemente, alteração da viscosidade cinemática. Desta forma, nota-se que a dependência típica da velocidade de chama laminar com a pressão, que apresenta expoentes negativos, pode ser modificada pela turbulência, invertendo o sinal do expoente.

Sharma & Mohan (1984) reportam resultados mostrando o efeito da intensidade turbulenta e da velocidade de entrada do escoamento na velocidade de chama turbulenta. A intensidade turbulenta foi definida pela razão entre a média quadrática de flutuação da velocidade do escoamento e a velocidade do escoamento ( $u'_{rms}/U$ ). São apresentadas correlações empíricas devidas a Wohl et al. (1953) e Lefebvre & Raid (1966), respectivamente dadas pelas eqs. (2.13) e (2.14),

$$S_T = S_L \left[ 1 + 26,2 \frac{u'_{rms}}{U} + 1,4 \left( \frac{U}{24} \right)^{1,12} \right] \quad (2.13)$$

$$S_T = S_L [1 + 0,43 u'_{rms} + 0,04U] \quad (2.14)$$

onde  $u'_{rms}$  e  $U$ , são dadas em ft/s. Ambos os resultados foram obtidos utilizando misturas de propano-ar e chamas fechadas em tubos horizontais.

Shchelkin (1947), estendendo trabalho de Damköhler (1947), propôs relação que considera os efeitos das menores escalas de turbulência sobre a velocidade de queima turbulenta, dada pela eq. (2.15),

$$S_T = S_L \sqrt{\frac{1 + \varepsilon}{D_M}} \quad (2.15)$$

onde  $D_M$  é a difusividade molecular e, neste caso específico,  $\varepsilon$  representa a difusividade turbulenta (ver Sharma & Mohan, 1984).

Ballal & Lefebvre (1974, 1975) conduziram experimentos com chamas fechadas de propano-ar em tubo, para avaliar a influência da escala e intensidade de turbulência na velocidade de queima e estrutura da chama. Identificaram três regimes diferentes, cada qual com características distintas em relação ao efeito de escala integral de turbulência na velocidade de queima turbulenta. Os efeitos encontrados são resumidos da seguinte forma (Sharma & Mohan, 1984): Para  $u'_{rms} < 2S_L$ , o fator de turbulência é proporcional à escala integral,  $l_0$ . Para  $u'_{rms} \cong 2S_L$ , o fator de turbulência independe de  $l_0$  e para  $u'_{rms} > 2S_L$ , o fator de turbulência é proporcional a  $l_0^{0,5}$ .

Turns (2000) comenta que muitas teorias têm sido desenvolvidas para relacionar chamas turbulentas às características do escoamento, baseadas no conceito de regime de chamas plissadas. Cita como exemplo Andrews et. al (1975), que apresentaram 13 diferentes modelos. Mostra mais três exemplos de modelos, devidos a Damköhler (1947), eq. (2.16), Clavin & Williams (1982), eq. (2.17), e Klimov (1983), eq. (2.18),

$$S_T = S_L \left( 1 + \frac{u'_{rms}}{S_L} \right) \quad (2.16)$$

$$S_T = S_L \left\{ 0,5 \left[ 1 + \left( 1 + 8C \frac{u'_{rms}{}^2}{S_L^2} \right)^{1/2} \right] \right\}^{1/2} \quad (2.17)$$

$$S_T = 3,5 S_L \left( \frac{u'_{rms}}{S_L} \right)^{0,7} \quad (2.18)$$

As relações apresentadas mostram a dependência da velocidade de chama turbulenta com a média quadrática de flutuação da velocidade do escoamento,  $u'_{rms}$ , e a velocidade de chama laminar,  $S_L$ . Estas relações são baseadas em fundamentos teóricos, sendo que a constante de proporcionalidade,  $C$ , na eq. (2.17) vale aproximadamente 1, e a constante e o expoente da eq. (2.18) são baseados em dados experimentais da literatura russa (Klimov, 1983). Para pequenos valores de  $u'_{rms}/S_L$ , a eq. (2.17) se reduz na eq. (2.19),

$$S_T = S_L \left( 1 + C \frac{u'_{rms}}{S_L} \right)^2 \quad (2.19)$$

Comparações de dados experimentais com as relações devidas a Damköhler (1947) e Klimov (1983) mostram uma melhor concordância desta última (ver Turns, 2000). Turns (2000) relata a necessidade de maiores pesquisas que permitam desenvolver recomendações específicas dos fatores de turbulência apropriados para o propósito de projetos de engenharia.

Groff & Matekunas (1980) investigaram a velocidade de propagação de chama em motor de ignição por centelha, relacionando-a com parâmetros de turbulência medidos experimentalmente com anemômetro de fio quente durante ciclos sem combustão. As velocidades de propagação foram determinadas a partir de dados experimentais de pressão no interior do cilindro, utilizando um modelo de diagnóstico de propagação de frente de chama esférica. A evolução do raio de chama e velocidades de propagação foram comparadas com a filmagem da combustão utilizando câmera de 2400 quadros / s (2,5° de ângulo de virabrequim a 1000 rpm). Os experimentos foram realizados em motor teste monocilindro com razão de compressão de 6,85:1. Foram considerados na análise 96 testes, variando-se a velocidade do motor (500, 1000, 1500 e 2000 rpm) e o avanço de ignição (0°, 15° e 30° antes do ponto morto superior - APMS), para 4 posições diferentes da vela de ignição e duas válvulas de admissão, com diferentes níveis de promoção de turbulência. A razão de equivalência foi fixada em 0,9. Para as condições experimentais examinadas obtiveram a correlação para o fator de turbulência, dada pela eq. (2.20),

$$F_T = \frac{S_T}{S_L} = [2,00 + 1,21(u'_{rms}/S_L)(P/P_m)^{0,82}]S \left[ 1,07(r_f/30)^{1,04} \right] \quad (2.20)$$

onde  $P_m$  é a pressão medida sob o ciclo sem combustão e  $r_f$  é o raio da frente de chama. O parâmetro  $S$  foi otimizado para os dados de acordo com a relação  $S = 1,0 + 0,05\theta^{0,4}$ , variando de 1,0 a 1,2 com o aumento do avanço de ignição de 0° para 30° APMS. O último termo entre colchetes do lado direito da equação corresponde a um ajuste para o período inicial de desenvolvimento de chama, considerado neste caso desde a ignição até  $r_f = 30$  mm. Após o período de

desenvolvimento de chama, este termo não é considerado no cálculo do fator de turbulência.

Segundo estes autores a correlação encontrada apresentou boa correspondência com velocidades de propagação turbulentas apresentadas na literatura para chamas em outros equipamentos. Nota-se novamente o expoente positivo para a dependência com a pressão. O ajuste dos dados experimentais foi feito com coeficiente de determinação  $R^2 = 0,93$ . A abordagem quase dimensional adotando propagação de frente de chama esférica para diagnóstico e modelagem preditiva de combustão pré-misturada em motores mostrou potencial prático como ferramenta de otimização de câmaras de combustão. A aplicação do modelo no modo preditivo ainda requer o conhecimento do nível de turbulência dentro do cilindro.

Heywood (1988) faz referência a outra relação proposta no trabalho de Groff & Matekunas (1980), representada pela eq. (2.21), que não foi otimizada para o avanço de ignição, sendo, portanto mais geral. O coeficiente de ajuste dos dados experimentais foi  $R^2 = 0,91$ . A eq. (2.21) é aplicada após o período inicial de desenvolvimento de chama.

$$F_T = [1,77 + 1,46(u'_{rms}/S_L)(P/P_m)^{0,75}] \quad (2.21)$$

Ramos (1989) em seu trabalho dedicado à modelagem matemática de motores de combustão interna apresenta algumas correlações para o fator de turbulência, dentre as quais a eq. (2.22),

$$F_T = [1,00 + 4,01(u'_{rms}/S_L)](r_f/0,03)^{0,5} \quad (2.22)$$

onde o último termo entre parênteses do lado direito da equação é um ajuste para o período do desenvolvimento de chama, desde a ignição até  $r_f = 0,03\text{m}$ , só sendo utilizado neste período.

Nota-se que a modelagem da velocidade de propagação de chama turbulenta apresenta dificuldades no que diz respeito à determinação dos parâmetros de turbulência no interior do cilindro. O conhecimento destes parâmetros requer medições complicadas e de elevado grau de incertezas, sendo usualmente

realizadas em motores de teste, de geometria de câmara de combustão simples, operando com baixas rotações e cargas.

Barros (2003), em seu trabalho de modelagem de motores de ignição por centelha, corrige a velocidade laminar do combustível na condição padrão em função da temperatura e pressão, utilizando as relações propostas por Metghalchi & Keck (1982) e Heywood (1988), sem o termo referente ao fator de diluição. Devido às dificuldades existentes na determinação da energia cinética turbulenta média do gás dentro do cilindro para estimar-se o nível de turbulência do escoamento, propõe que o fator de turbulência seja estimado a partir do Reynolds de admissão, do diâmetro adimensional do pistão e do regime de combustão (regime de chamas plissadas e regime de flameletes). Baseado nos ensaios experimentais em motores *MIT* (*Massachusetts Institute of Technology*), de Gaboury et al. (em Taylor, 1988), Barros (2003) apresenta duas relações para o fator de turbulência, dadas pelas eqs. (2.23) e (2.24),

$$F_T = C Re_{ad}^{1,28} (D_p/D_0)^{-0,45}; Re_{ad} < 25000 \quad (2.23)$$

$$F_T = C Re_{ad}^{0,72} (D_p/D_0)^{-0,45}; Re_{ad} \geq 25000 \quad (2.24)$$

onde  $C$  é uma constante que varia com o motor. Estas relações são válidas para  $5000 \leq Re_{ad} \leq 55000$ ,  $2,5 \leq D_p/D_0 \leq 6,0$  e  $D_0 = 0,0254$  m. Os motores *MIT* possuem projeto padrão, com câmara de combustão cilíndrica e vela central.

As correlações apresentadas para a velocidade de chama turbulenta em motor apresentam algumas características, que podem figurar associadas ou não, tais como: dependência direta com a velocidade de chama laminar; dependência de pressão com expoente positivo; dependência direta com uma dimensão característica da câmara de combustão e dependência com o nível de turbulência.

Baeta (2006) desenvolveu uma metodologia experimental para maximizar o desempenho de um motor multicomcombustível (etanol, gasolina e GNV) turboalimentado, sem prejudicar a eficiência global do motor. Um turboalimentador, uma central eletrônica programável e um kit de conversão para GNV de 5ª geração (Melo et al., 2006) foram instalados no motor, que foi calibrado para cada combustível controlando-se a pressão de turboalimentação.

Foram feitas medições de pressão no cilindro para análise de parâmetros da combustão e de outras variáveis de desempenho do motor (potência, consumo, etc.). A partir dos dados de pressão foram realizadas investigações preliminares das velocidades de propagação de chama turbulentas no interior do cilindro, utilizando a metodologia de Barros (2003) na forma de diagnóstico. Foram identificadas tendências coerentes de aumento da velocidade de propagação de chama com o aumento da rotação e aumento da razão volumétrica de compressão, em função, respectivamente, do aumento de turbulência e aumento de massa específica e temperatura na câmara de combustão.

Rassweiler & Withrow (1938) desenvolveram uma metodologia para calcular a fração de massa queimada a partir da fração de volume queimado em motores de ignição por centelha, permitindo relacionar a propagação da chama turbulenta com a taxa de queima. Foi utilizado um motor de teste monocilindro, de razão de compressão 4,6:1, operando a 900 rpm com iso-octano, em plena carga e 25° APMS de avanço de ignição. Foi realizada a filmagem da combustão, que mostrou a posição da chama em intervalos de 2,4° do eixo virabrequim, simultaneamente à medição da pressão no interior da câmara de combustão.

A posição da chama foi identificada em modelos de gesso da câmara de combustão para diferentes posições do ângulo do virabrequim. Os modelos foram cortados ao longo da posição da chama, aproximada para a forma cilíndrica, sendo determinado o peso dos dois volumes, queimado e não queimado. A partir da massa específica constante dos modelos de gesso, sabe-se o percentual de volume queimado. A identificação da fração de massa queimada foi realizada a partir da análise da pressão no interior do cilindro. Primeiramente, observaram a existência de uma relação linear de variação do logaritmo da pressão com o logaritmo do volume instantâneo da câmara de combustão durante as fases de compressão e expansão do fluido de trabalho, com coeficiente angular médio de 1,3. Assumiram que a mesma relação permanece durante todo o período da combustão para os gases não queimados, que sofrem, portanto, um processo politrópico aproximado. Assim, para um determinado momento da combustão, identifica-se o volume não queimado e calcula-se pelo processo politrópico qual seria seu volume no momento da ignição. Assumindo-se uma massa específica constante para a mistura na ignição, calcula-se a fração de massa queimada.

A importância histórica deste trabalho foi lançar as bases que permitem correlacionar a propagação da chama com a taxa de calor liberado (fração de massa queimada), permitindo também relacionar a velocidade de propagação de chama turbulenta com a velocidade de chama turbulenta no interior do motor de ignição por centelha.

Heywood (1988) apresenta relação entre a velocidade de propagação de chama turbulenta, aqui representada por  $V_{pch}$  para diferenciação, e a velocidade de chama turbulenta, aqui representada por  $S_T$ . A eq. (2.25) foi obtida a partir da relação entre fração de massa queimada e fração de volume queimado, com aplicação da lei dos gases ideais em ambos os volumes, queimado e não queimado.

$$\frac{V_{pch}}{S_T} = \frac{\rho_{ub}}{\rho_b} (1 - Y_b) + Y_b = \frac{\rho_{ub}/\rho_b}{[(\rho_{ub}/\rho_b) - 1]X_b + 1} \quad (2.25)$$

Na eq. (2.25),  $\rho_{ub}$  e  $\rho_b$  são, respectivamente, as massas específicas dos gases não queimados e queimados,  $Y_b$  é a fração de volume queimado e  $X_b$  a fração de massa queimada. A dificuldade reside na determinação entre a razão de massas específicas dos gases não queimados e queimados ( $\rho_{ub}/\rho_b$ ). Segundo Heywood (1988) esta razão situa-se em torno de 4 nos motores de ignição por centelha. A importância desta relação reside em estimar a posição da frente de chama dentro da câmara de combustão sem o conhecimento da velocidade média do escoamento dos gases dentro do cilindro.

Al-Baghdadi (2008) estudou o efeito de misturas de até 30% de etanol em gasolina no desempenho e emissões do motor monocilindro *Ricardo E6/US*. Utilizou um modelo quase dimensional de duas zonas e propagação de frente de chama esférica para estudar a influência do teor de etanol no ciclo termodinâmico do motor, incluindo estimativa da velocidade de propagação de chama turbulenta dentro do cilindro. Na análise dos parâmetros de combustão via simulação comparou a gasolina pura com a mistura de gasolina com 15% em volume de etanol. A razão de compressão adotada foi 8:1, velocidade de 1500 rpm, avanço de ignição fixo e razão de equivalência estequiométrica. Modelou a velocidade de propagação de chama turbulenta de forma semelhante a Barros (2003). Corrigiu a velocidade laminar do combustível na condição padrão em função da temperatura

e pressão, utilizando as relações propostas por Metghalchi & Keck (1982) e Heywood (1988). Adotou um fator de turbulência para calcular a velocidade de chama turbulenta, que, por sua vez, foi corrigida para a velocidade de propagação de chama turbulenta com a eq. (2.25), apresentada em Heywood (1988). Foi necessário calibrar o fator de turbulência de tal forma a ajustar a curva de pressão experimental à simulada, para a gasolina pura (linha de base). O fator foi então mantido constante. A adição de etanol melhorou o processo de combustão, reduzindo o atraso de ignição, reduzindo a duração de combustão e elevando a velocidade de propagação de chama turbulenta.

Os trabalhos mais recentes do ponto de vista experimental focam no levantamento de parâmetros relacionados com a validação de modelos de combustão baseados na cinética química (Merola et al., 2010), que permitem estimativas das velocidades de chama laminares. Do ponto de vista de simulação de motores, os trabalhos mais recentes tratam de modelos computacionais tridimensionais (*CFD*). Nestes, a velocidade de propagação de chama é estimada compondo-se o campo de velocidades do escoamento, proveniente da solução da equação de conservação da quantidade de movimento, com a velocidade de chama laminar, corrigida por relações dos efeitos da turbulência, já discutidas anteriormente (AVL, 2010; Hvezda, 2011; Gurupatham & Teraji, 2011; Sjeric et al., 2012).

## **2.4. Comentários**

A Revisão Bibliográfica foi pautada no sentido de mostrar os diferentes aspectos, áreas de estudo e desenvolvimentos que se relacionam com a aplicação de combustíveis em motores de combustão interna. Foram identificadas a evolução e o estágio atual das pesquisas nas áreas abordadas neste trabalho: formulações reduzidas de combustíveis; interações de componentes com propriedades de combustíveis, parâmetros de combustão e parâmetros de desempenho em motores; velocidades de chama laminares e turbulentas; modelagem de motores de ignição por centelha, com maior foco na combustão e velocidade de propagação de chama no interior do cilindro do motor. Também foram identificadas limitações e lacunas existentes desde as pesquisas científicas

de base, passando por experimentação e modelagem, até a aplicação final do combustível no motor. O Capítulo 3, a seguir, apresenta os objetivos do presente trabalho no sentido de fornecer contribuições científicas de forma integrada e inéditas nestas áreas.