

2

Revisão da Literatura

Este capítulo tem como objetivo, apresentar as fontes bibliográficas e princípios teóricos mais importantes do processo de combustão em motores de ignição de por compressão operando no modo biocombustível. Em esta etapa, tais estudos são analisados com a finalidade de que possam ser aplicados de forma apropriada na otimização do desempenho e consumo do combustível não fóssil.

2.1

Ignição por Compressão

A combustão em motores Diesel tem características distintas em relação aos motores do ciclo Otto. Para os motores Otto, a combustão se propaga através de uma frente de chama, iniciada por uma centelha, proveniente da vela de ignição. Já nos motores de ignição por compressão, a combustão é por difusão, ou seja, tem início em varias regiões da câmara de combustão. Nesta combustão as temperaturas iniciais são mais baixas, quando comparadas às temperaturas iniciais da combustão do ciclo de ignição por centelha.

Ressalta-se que para o processo de combustão do ciclo Diesel o ar é admitido e comprimido, onde, ao final da compressão, o combustível (óleo diesel) é injetado. Salienta-se que a combustão do óleo diesel será através da alta temperatura do ar, pois este combustível, quando injetado, encontrará na câmara as condições necessárias para sua autoignição, propiciadas pela pressão e temperatura elevadas do ar [22].

A introdução do combustível óleo diesel pelo bico injetor (pequeno orifício) a alta pressão ocasiona o aumento da velocidade de injeção, que tem por finalidade "quebrar" o combustível em gotículas para formar o spray. Esta névoa, juntamente com o ar escoado para o interior do cilindro, será responsável pela formação da mistura apropriada para o início da queima. O correto entendimento sobre a dispersão do combustível no ar é importante, a fim de projetar motores mais eficientes. A eficiência de queima do óleo diesel, está ligada à emissão de gases poluentes [23]. Em relação ao processo de queima do combustível em motores do ciclo Diesel, destacam-se diferentes fases. Estas

possuem características bastante distintas. Não é possível prever corretamente o início e término de cada uma das fases pois há interposição entre elas. As fases da combustão são apresentadas na Figura 2.1 e descritas a seguir.

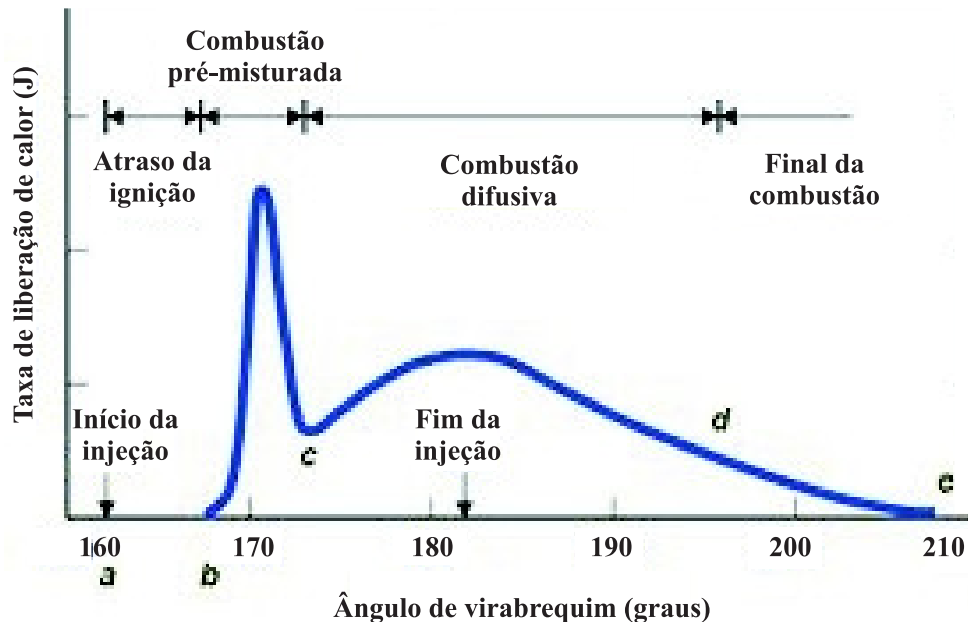


Figura 2.1: Fases de combustão - ignição por compressão.

Fonte: Typical DI engine heat - release - rate diagram identifying different diesel combustion phases [23].

- Fase I, o momento do atraso da ignição que, conforme será detalhado posteriormente, é composto pelos atrasos, químico e físico, sendo caracterizado pelo intervalo entre o início da injeção até o início da combustão.
- Fase II, a combustão pré-misturada ou combustão rápida caracteriza-se pelo intervalo entre o início da combustão indo até o ponto de máxima pressão do ciclo. Neste período, existe uma elevação brusca de pressão devido a certa quantidade de combustível já misturado ao ar na fase I queima de forma acelerada graças à cinética dos gases. Esta grande elevação de pressão provoca o ruído característico do funcionamento dos motores Diesel [23].
- Fase III, a combustão difusiva ou combustão controlada sucede o momento da combustão pré-misturada. A combustão se propaga de forma mais lenta, visto que depende da taxa em que a mistura torna-se disponível para queima. Ou seja, sabe-se que uma parcela da mistura ar / combustível não está adequada até o momento da ignição. Nesta

fase, a queima é realizada por várias frentes de chama, ou seja, se difunde pela câmara de combustão [23].

- Fase IV, Processo final da combustão. Esta ocorre de forma difusiva e a queima acontece a uma taxa decrescente à medida que o combustível e o oxigênio são consumidos (Bueno, 2003). Os reagentes e a liberação de energia tornam-se cada vez menores, até o ciclo se completar com a abertura da válvula de exaustão. Nesta etapa, há grande produção de material particulado e uma grande perda de calor por radiação. Salienta-se que a cinética dos gases diminui conforme a temperatura no interior do cilindro decresce durante a expansão.

Em relação à frente de chama em motores de ignição por compressão, se destaca que este fenômeno divide a câmara em gases queimados e não queimados (a queimar) [24]. A frente de chama é uma zona de intensa reação química em que se distinguem as chamas de pré-misturas e chamas difusivas. Nos motores ICO a existência da difusão da chama é devido aos reagentes estarem inicialmente separados, onde a mistura e a reação química ocorrem somente na interface entre o combustível e o ar. Como já retratado, estas chamas ocorrem com diferentes intensidades. Neste caso, ainda existe a formação da mistura durante a autoignição resultando na elevação de pressão na câmara de combustão. A seguir, se faz uma breve descrição dos parâmetros de análise do processo de combustão.

2.1.1 Detonação

O mau funcionamento, conhecido como detonação ou também, como knocking, pode levar a perda total do motor. O entendimento claro deste fenômeno é fundamental para evitar um possível acontecimento.

O fenômeno da detonação não possui uma explicação completa [23]. A ocorrência do knocking pode ser entendida como uma rápida liberação de energia contida na mistura ar-combustível, através da ignição espontânea com altas pressões e temperaturas. Essa liberação se dá por uma propagação de chama turbulenta que, como resultado, promove altas pressões locais que se propagam em ondas de choque pela câmara de combustão provocando o ruído característico.

A ocorrência deste fenômeno pode ser devido à resistência do combustível à detonação (propriedades do combustível) e também pelas características geométricas do conjunto cilindro-pistão, a qual pode não favorecer a um escoamento adequado dos gases, dificultando a formação da mistura [25].

2.1.2

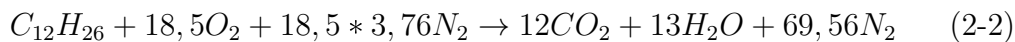
Combustão Ideal

Na combustão ideal ou combustão completa, que normalmente é conhecida como combustão estequiométrica, todo o oxigênio presente na câmara de combustão reage com o combustível e produz dióxido de carbono (CO_2) e vapor de água (H_2O). Na prática, a combustão perfeita é impossível de ser atingida. Normalmente se obtém uma combustão mais próxima da completa quando se fornece à câmara de combustão uma maior quantidade de ar do que é requerido. Este procedimento é conhecido como "ar em excesso", e seu controle é a chave para otimizar a eficiência da combustão. É importante lembrar que a parcela em massa de oxigênio contida no ar ambiente é de 23% [26] do total dos gases.

A relação ar-combustível (A/C) pode ser calculada em base mássica ou em base molar [27]:

$$(A/C)_S = \frac{m_{ar}}{m_{comb}} \quad (2-1)$$

Na equação, é utilizada a letra "S", para indicar que a relação se refere a 100% do ar teórico, também conhecido como ar estequiométrico. O balanço da equação 2-2 da combustão estequiométrica para o óleo diesel é dada por:

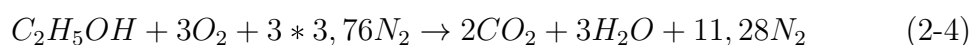


Desta forma, pode-se encontrar a razão ar-combustível:

$$(A/C)_{sd} = \frac{(18,5 * 32) + 69,56 * 28}{170} = 14,93 \text{ kg}_{ar} / \text{kg}_{óleodiesel} \quad (2-3)$$

A partir deste valor, tem-se então a quantidade de ar necessário para cada quilograma de óleo diesel, em um processo de combustão perfeita.

Já para o etanol, o balanço da equação da combustão é dada por:



Com base na equação 2-4, tendo em conta os valores de massa molar para o oxigênio e etanol sendo 32 g/mol e 46 g/mol respectivamente, e com 23% de massa de oxigênio em relação ao ar teórico, tem-se a relação ar / combustível para o processo de combustão perfeita do etanol que é descrito da seguinte forma:

$$(A/C)_{Se} = \frac{(3 * 32 + 11,28 * 28)}{46} = 8,95 kg_{ar}/kg_{etanol} \quad (2-5)$$

2.1.3

Atraso da ignição

Como já mencionado, o atraso da ignição é compreendido pelo intervalo entre o início da injeção de combustível e o início da combustão, conforme Figura 2.2. Este atraso é o resultado de uma combinação entre as características do conjunto cilindro-pistão e o combustível para uma dada condição de operação. Para quantificar o atraso, há a necessidade do entendimento dos diversos fenômenos ocorrendo de forma consecutiva e simultânea em relação ao aquecimento do combustível em contato com o ar, como também pela formação de uma mistura, adequada para a autoignição [28].

Vale ressaltar que a definição do início da combustão é de difícil análise. A avaliação da origem da combustão, para um dado ângulo do virabrequim, é complexa. No entanto, um método utilizado para estes estudos emprega a curva de pressão no interior do cilindro, conforme Figura 2.2. Esta pressão é medida através de um transdutor de pressão especial. Nos motores de ignição por compressão este atraso varia, tipicamente, entre 1,5 e 10 graus do ângulo de virabrequim. Vários fatores afetam o atraso da ignição. Entre estes citam-se [23]:

- Razão de compressão: seu aumento eleva a pressão e a temperatura do ar na câmara de combustão na compressão. Além disso, a temperatura mínima de autoignição diminui com o aumento da densidade do ar, diminuindo assim o atraso da ignição;
- Velocidade angular do motor: seu aumento faz com que as perdas de calor durante o processo de compressão diminuam, incrementando de tal

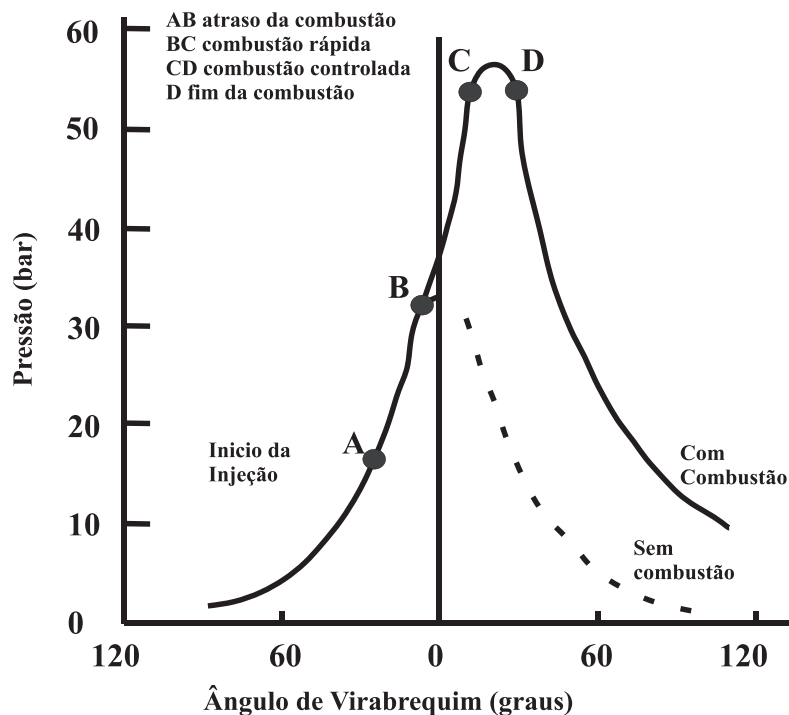


Figura 2.2: Atraso da ignição.

Fonte: Different stages of combustion in CI engines [29].

forma a temperatura e pressão do ar, e como consequência disto o atraso da ignição diminui;

- Potência: seu aumento corresponde a uma diminuição na razão ar / combustível, o que leva a um aumento de temperatura e uma consequente diminuição do atraso da ignição;
- Atomização: uma melhor atomização reduz o atraso da ignição. Uma maior viscosidade e uma menor volatilidade prejudicam a atomização, aumentando o atraso da ignição;
- Avanço da injeção de combustível: um dos fatores com maior influência sobre o atraso da ignição. Seu aumento leva o combustível a encontrar o ar no cilindro a temperaturas menores, aumentando o atraso;
- Temperatura do ar admitido: seu aumento produz um aumento na temperatura do ar comprimido, melhorando, desta forma, a vaporização do combustível, diminuindo assim o atraso da ignição. Porém, esse aumento de temperatura no ar provoca uma redução em sua densidade, reduzindo a eficiência volumétrica e consequentemente a potência;
- Pressão do ar admitido: o aumento da pressão do ar admitido, aumenta a pressão e temperatura do ar comprimido, reduzindo a temperatura de autoignição e assim o atraso de ignição;

- Qualidade do combustível: um importante indicador da qualidade de ignição do combustível é o número de cetano. Ele mede a qualidade de ignição de um combustível para máquina Diesel e tem influência direta na partida do motor e no seu funcionamento sob carga. Fisicamente, o número de cetano se relaciona diretamente com o atraso de ignição de combustível no motor de modo que, quanto menor o número de cetano, maior será o atraso da ignição. Consequentemente, maior será a quantidade de combustível que permanecerá na câmara sem queimar no tempo certo. Isso leva a um mau funcionamento do motor, pois quando a queima acontecer, gerará uma quantidade de energia superior àquela necessária. Esse excesso de energia força o pistão a descer com velocidade superior a do projeto, o que provocará esforços anormais sobre o pistão, podendo causar danos mecânicos e perda de potência. Combustíveis com alto teor de parafinas apresentam alto número de cetano, enquanto produtos ricos em hidrocarbonetos aromáticos apresentam baixo número de cetano. Devido a isso, na determinação dessa característica, o desempenho do diesel é comparado com o desempenho do n-hexadecano, produto parafínico comercializado como cetano, ao qual é atribuído o número de cetano igual a 100. A um produto aromático (alfa mentil-naftaleno) é atribuído o número de cetano igual a zero. A determinação do número de cetano requer o uso de um motor de teste padrão (motor CFR) operando sob condições também padronizadas [30].

O atraso da ignição é normalmente dividido em duas fases que se relacionam. Estas fases são conhecidas como atraso físico e atraso químico, conforme ilustrado na Figura 2.3.

2.1.3.1

Atraso Físico

Este fenômeno é compreendido como o intervalo entre o início da injeção de combustível até a formação da mistura em qualquer ponto da câmara de combustão. As zonas de misturas formadas aparecem em função do tempo. Estas ocorrem onde a mistura está superaquecida e o combustível completamente vaporizado. Salienta-se que não existe procedimento de cálculo, entretanto mencionam-se tópicos qualitativos [28].

- A magnitude deste atraso é semelhante ao atraso químico, concluindo-se então que este não é desprezível;
- A mudança na volatilidade do combustível apresenta um pequeno efeito no atraso físico;

- O atraso físico se correlaciona com o atraso químico, tendo em vista que o mesmo determina a temperatura e a relação ar/combustível nas zonas em que ocorre a autoignição.

É importante mencionar que, os fenômenos relacionados à difusão e às características hidrodinâmicas da câmara de combustão são mais determinantes em relação à temperatura de vaporização [28].

2.1.3.2

Atraso Químico

Denomina-se o atraso químico como o intervalo de tempo entre a formação da mistura e o início da combustão como se mostra na Figura 2.3, sendo função unicamente do número de cetano (NC) de combustível. A evaporação do combustível forma zonas onde a temperatura aumenta rapidamente possuindo uma maior chance de sofrerem as reações preliminares da autoignição [23].

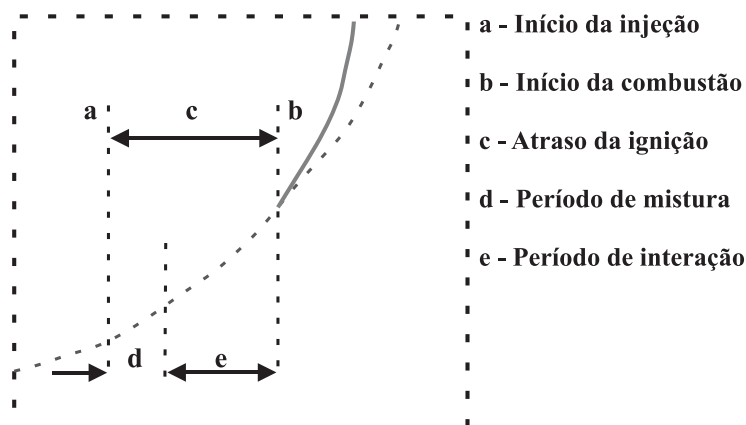


Figura 2.3: Etapas do atraso da ignição.

Fonte: Extended view of ignition delay [29].

2.2

Uso de etanol em motores de ignição por compressão

A revisão da literatura sobre o uso de etanol em motores de ignição por compressão, tem como principal enfoque o uso de cadeias carbônicas pequenas, especificamente o metanol (ou álcool metílico) e o etanol (ou álcool etílico), como as melhores alternativas energéticas para a substituição parcial ou total do óleo diesel em motores de ignição por compressão.

O metanol (CH_3OH) é um líquido incolor com peso molecular igual a 32,04 g/mol, que geralmente é produzido a partir de gases de síntese (misturas

de hidrogênio e óxidos de carbono) obtidos na reforma de hidrocarbonetos, principalmente do metano que compõe o gás natural [31]. Também pode ser produzido a partir do carvão de origem mineral ou vegetal (biomassa), por meio de processos mais complexos e de maior custo.

O etanol (C_2H_5OH) pode ser obtido a partir da fermentação da sacarose (presente em vários produtos da biomassa, tais como a cana-de-açúcar, a beterraba e o sorgo) bem como de amidos (milho, mandioca, batata, trigo, arroz). No entanto, o amido é um tipo de carboidrato mais complexo, que precisa passar por mais transformações do que a sacarose para gerar o etanol. No Brasil, a produção do álcool combustível (etanol ou álcool etílico) provém quase exclusivamente da cana-de-açúcar (fonte renovável). Na produção do etanol, no entanto, é necessário diferenciar o etanol anidro (ou álcool etílico anidro) do etanol hidratado (ou álcool etílico hidratado). A diferença aparece apenas no teor de água contida no etanol: enquanto o etanol anidro tem o teor de água em torno de 0,5%, em volume, o etanol hidratado, vendido nos postos de combustíveis, possui cerca de 5 % de água, em volume (embora a especificação brasileira defina essas características em massa, o comentário feito expressa os dados em volume, para harmonização da informação com a prática internacional) [32]. Na especificação brasileira, o teor alcoólico máximo é de 99,3% (p/p) para o etanol anidro [33], e de 92,6 - 93,8% (p/p) para o etanol hidratado [34].

Hoje em dia os álcoois são fortes candidatos na substituição do óleo diesel pelo combustível de fonte renovável, com o objetivo de reduzir as emissões de poluentes. Isto se deve ao fato de que os álcoois contêm oxigênio em sua molécula, são mais voláteis e porque também é possível adicionar água na sua composição. As características descritas anteriormente são geralmente favoráveis para uma boa combustão. Mas é importante destacar que devido à adição de água no combustível, o PCI e número de cetano diminuem. Também é importante mencionar, que a menor composição do carbono na molécula dos álcoois favorece a emissão quase nula de material particulado. No ciclo completo do etanol (produção-uso) a emissão de dióxido de carbono pode também ser considerada nula [35].

Atualmente as pesquisas relacionadas ao uso dos álcoois em motores de ignição por compressão são maiores com relação às décadas passadas. As principais dificuldades enfrentadas no passado e hoje são mostradas a seguir [36]:

- é necessária maior quantidade, tanto em massa quanto em volume, de álcool combustível (devido à menor densidade de energia), se comparado com o óleo diesel;

- álcoois possuem baixos números de cetano, enquanto que um motor ICO necessita de combustíveis de altos índices de cetano para facilitar sua autoignição, com reduzido tempo de atraso na ignição;
- óleo diesel possui poder lubrificante, o que não ocorre com o álcool;
- a baixa capacidade de autoignição do álcool provoca detonação severa, uma vez iniciada a queima (rápida) do combustível evaporado;
- extinção da chama, em alguns casos, devido ao alto calor latente de vaporização do álcool.

Para melhor compreensão deste trabalho, é importante mencionar e descrever os seis métodos mais utilizados na queima de álcool em motores ICO, divididos de acordo com a capacidade de substituição do óleo diesel [35]:

- substituição parcial através de misturas etanol-diesel;
- substituição parcial por meio de misturas etanol-diesel utilizando surfactantes ("emulsões");
- substituição parcial pela dosagem de etanol no coletor de admissão ("fumigação"), com jato piloto de diesel na câmara de combustão;
- substituição parcial pelo uso da dupla injeção (uma para o etanol e outra para o óleo diesel), liberando os combustíveis diretamente na câmara de combustão;
- substituição total através da conversão do motor do ciclo Diesel para o ciclo Otto ("ottolização");
- substituição total pela adição de aditivos ao etanol como melhoradores da autoignição (para aumentar o número de cetano), além de lubrificantes e inibidores da corrosão.

A seguir, serão descritas as principais características e procedimentos dos métodos mais utilizados na queima do álcool em motores ICO, principalmente do último método (empregado neste trabalho), incluindo alguns dos trabalhos mais relevantes sobre o tema.

2.2.1

Misturas etanol - diesel

A mistura do etanol no óleo diesel, sem a dosagem de aditivos, é o procedimento mais simples na utilização de um combustível alternativo de caráter renovável em motores de ignição por compressão. Mas esta técnica é aplicável para o etanol em baixas concentrações, devido à limitada miscibilidade do etanol no óleo diesel. O etanol com a gasolina formam misturas homogêneas em todas as proporções [37].

A adição de etanol ao óleo diesel modifica certas propriedades, tais como a miscibilidade da mistura, viscosidade, lubricidade, poder calorífico inferior e número de cetano [38]. Portanto, o uso do etanol mediante esta técnica está restrito a pequenas concentrações da mistura, tipicamente inferiores a 20% v/v [39]. Já com a adição de surfactantes, este percentual aumenta.

Por causa da pouca miscibilidade do etanol no óleo diesel, a tendência à separação das fases é maior e é uma das grandes dificuldades encontradas. Essa tendência aumenta com a presença da água (etanol hidratado), diminuição da temperatura, aumento da concentração do etanol e com a composição do óleo diesel [40]. A natureza higroscópica do etanol influencia no incremento gradual da massa de água na mistura armazenada [39]. A mistura das fases etanol - diesel, usualmente pode ser viabilizada mediante a utilização de emulsificadores que permitem suspender pequenas gotas de etanol dentro do óleo diesel [40].

Pesquisas iniciais relacionados à utilização de misturas etanol - diesel em motores de ignição por compressão, foram iniciadas na década de 1970 na África do Sul, e continuadas nos Estados Unidos e na Alemanha, na década de 1980 [41].

Diversos experimentos de laboratório e de campo foram realizados utilizando misturas de etanol e óleo diesel, com diversas concentrações de etanol anidro (até 30% v/v). As experiências foram realizadas em dois motores diesel de injeção direta, naturalmente aspirados e com razão de compressão 16,8:1, os quais eram utilizados na propulsão de tratores e máquinas agrícolas [42]. Os sistemas de injeção dos motores não foram alterados durante os testes com as misturas de etanol e óleo diesel. As máximas potências foram reduzidas quando os motores operavam com as misturas. O consumo específico de combustível, a intensidade do ruído e o atraso da ignição foram maiores, comparados aos valores reportados durante o funcionamento com óleo diesel puro. Estas mudanças nos parâmetros de operação dos motores crescem, em magnitude, à medida que a proporção de etanol utilizado na mistura com diesel aumenta.

Resultados similares também foram obtidos em outras experiências. Comparando o desempenho do motor ICO com e sem etanol, foi observado

um maior consumo do primeiro, porém com o mesmo desempenho para ambos combustíveis. É importante mencionar que foi observado uma menor produção de fumaça, produto da combustão da mistura etanol - óleo diesel [43] [44].

Com a finalidade de determinar o desempenho e durabilidade dos motores de tratores agrícolas, se realizou outra experiência, onde uma mistura de óleo diesel com 15% de etanol anidro foi testada. Não se utilizou nenhum aditivo e o sistema foi testado sob condições de campo. Foram tomados os cuidados necessários para minimizar a contaminação da mistura com a água. Foi observada uma pequena redução no desempenho do motor utilizando a mistura de óleo e etanol, com relação aos testes feitos com óleo diesel puro. É importante mencionar que não foram observadas deteriorações significantes no motor ou no seu sistema de injeção, após mil horas de teste [45] [46].

Uma das vantagens da utilização das misturas etanol com óleo diesel é a necessidade de poucas mudanças nos principais componentes do motor. Apenas pequenos ajustes no avanço da injeção do combustível e a quantidade de combustível injetado podem ser requeridos para manter a potência original do motor, devido ao fato de que a presença do etanol na mistura origina um maior atraso da ignição e diminui o poder calorífico inferior quando comparados aos mesmos parâmetros do óleo diesel puro. Tais ajustes dependem da concentração do etanol na mistura e dos seus efeitos na combustão [39].

Com relação às emissões, geralmente o teor de hidrocarbonetos não queimados aumenta com a concentração de etanol na mistura. As emissões de monóxido de carbono comumente permanecem iguais ou aumentam levemente, enquanto os óxidos de nitrogênio são maiores ou ligeiramente inferiores ao modo diesel puro, dependendo do tipo e configuração do motor. A fumaça e a emissão de particulados tendem a diminuir na proporção em que o etanol é incrementado [36] [39].

2.2.2

Emulsões etanol - diesel

Vantagens das misturas etanol - diesel podem ser associadas às emulsões álcool - diesel. Mas é importante destacar que, ao contrário das misturas, as emulsões são diferenciadas pelo uso de agentes emulsificantes (ou surfactantes) e pela possibilidade de escolha da mistura combustível (à base de etanol ou metanol). Emulsões álcool - diesel podem garantir reduções de até 40% no consumo de óleo diesel [35].

Os emulsificantes são substâncias adicionadas às misturas para aumentar a estabilidade, tornando-as razoavelmente constantes e homogêneas. A quantidade de surfactante em uma emulsão álcool - diesel, dependerá do tipo de

álcool e das propriedades físico - químicas do óleo diesel. Normalmente, os surfactantes aumentam a tolerância da quantidade água nas emulsões álcool - diesel, em comparação com o limitado uso de água nas simples misturas etanol - diesel. Portanto, é possível a utilização dos álcoois hidratados nas emulsões.

Entre as desvantagens das emulsões, podem-se destacar suas limitadas propriedades físicas em baixas temperaturas, além do custo elevado dos emulsificantes. Emulsões, principalmente aquelas que contem água, tendem a se tornar muito mais viscosas em temperaturas próximas do 0°C [39].

Devido à presença do álcool nas emulsões álcool - diesel, existe uma mudança nas propriedades do óleo diesel e é por isso que diversos pesquisadores sugerem o uso de aditivos nas emulsões. Estes aditivos deveriam ter a função de manter a viscosidade adequada da emulsão para a lubrificação do sistema de injeção, agir inibindo a corrosão, mantendo as estruturas metálicas livres da corrosão promovida pela presença da água, diminuir o calor latente de vaporização e aumentar o número de cetano da emulsão para atingir propriedades de autoignição satisfatórias.

Estudos iniciais apresentaram dados relativos às propriedades físicas das emulsões metanol - diesel e etanol - diesel, com 20% v/v de concentração de álcool. Os álcoois foram insolúveis no combustível diesel pela adição de água (1,75% v/v) nas misturas. Com a finalidade de estabilizar a mistura, foi adicionado à mistura uma concentração de surfactante (3,25% v/v) [47]. Os resultados apresentados, mostraram que os valores de poder calorífico e o número de cetano das emulsões foram inferiores aos valores correspondentes do óleo diesel puro. A diminuição do poder calorífico das emulsões deve-se à menor energia específica dos álcoois e também à presença de água nas mesmas. É importante mencionar que o número de cetano na emulsão metanol - óleo diesel foi menor em comparação com a emulsão etanol - óleo diesel.

Posteriormente, foi verificado que as emulsões contendo metanol (20% v/v), diminuía a potência máxima do motor de ignição por compressão em aproximadamente 9% [48]. Os níveis de emissões produzidos nos testes de motor operando com misturas ou emulsões, não mostraram diferenças significativas [39].

Estudos investigaram ainda os efeitos das emulsões etanol - óleo diesel sobre as emissões e desempenho em um motor de ignição por compressão, com quatro cilindros, injeção direta, com turbo-compressor e razão de compressão 21,5 : 1 [49]. Todos os experimentos foram realizados à plena carga, com mudanças na pressão de injeção das misturas (150, 200 e 250 bar). As emulsões testadas tiveram concentrações de 10% e 15% v/v de etanol anidro, com adição de 1% v/v de isopropanol para garantir a homogeneidade e evitar a separação

de fase. Os resultados demonstraram que a adição de 1% v/v de isopropanol nas emulsões satisfaz e impede a separação de fases. A adição de etanol reduziu as emissões de CO, fumaça e SO₂, mas ao mesmo tempo, origina um aumento das emissões de NO_x e diminuição da potência do motor em aproximadamente 12,5% (para adição de 10% de etanol) e 20% (para adição de 15% de etanol). Verificou-se que o nível de redução das emissões de SO₂ é maior do que a proporção de etanol presente na mistura, isto pode ser associado à geração de sulfato (SO₄) com excesso de oxigênio a plena carga. O aumento da pressão de injeção de combustível origina uma diminuição das emissões de CO e de fumaça, especialmente entre 1500 e 2500 rpm, mas ao mesmo tempo aumenta as emissões de NO_x e diminui a potência do motor. Alguns desgastes no sistema de injeção de combustível foram detectados no final das experiências, provavelmente devido às baixas viscosidade e lubricidade do etanol.

Estudo recente mostra o desenvolvimento de aditivos com a finalidade de aumentar a miscibilidade de misturas diesel e etanol (10% v/v) [37]. Este estudo mostra que a proporção etanol / óleo diesel e as composições químicas do óleos afetam a miscibilidade e a temperatura crítica de miscibilidade das misturas. Ambas aumentam com o aumento do teor de aromático do derivado de petróleo e diminuem fortemente mesmo para pequenas quantidades de água presentes nos sistemas. O par de aditivos ácido - base e ácido oléico - dodecilamina, mostrou melhor desempenho na homogeneização das misturas de óleo diesel e etanol (10% v/v) para um amplo intervalo de temperaturas. As alterações das propriedades dos combustíveis (número de cetano) em função da adição do etanol, não foram substanciais (menor que 10%) e foram corrigidos pela adição de pequenas quantidades de aditivos (nitrato 2 - etil - hexila).

2.2.3

Injeção de etanol no coletor de admissão ("fumigação")

Durante a década de 1950, um grupo de pesquisa, no intento por reduzir as emissões de fumaça dos motores Diesel, trabalhou com a injeção de combustíveis substitutos na linha de admissão de ar do motor [50]. Essa técnica foi denominada "fumigação", e a partir de então este termo foi amplamente utilizado pela comunidade acadêmico - científica para definir o processo pelo qual a energia química requerida pelo motor de combustão interna é fornecida através de uma pré - mistura ar / combustível. A queima da carga fumigada é realizada após a auto - ignição de um pequeno volume de óleo diesel injetado no interior do cilindro (de forma similar à injeção tradicional em um motor de ignição por compressão). Na utilização deste método é importante destacar os seguintes aspectos [36]:

- Este método requer o mínimo de modificações no motor, porque o álcool pode ser injetado por meio de um dispositivo apropriado, diretamente no coletor de admissão do motor.
- O sistema de injeção de etanol pode ser isolado do sistema de injeção de óleo diesel, possibilitando a flexibilidade de operação nos modos através de comandos relativamente simples e de baixo custo.
- A injeção de etanol por meio desta técnica, permite substituir com facilidade até 50% de óleo diesel em termos de energia.

Em um motor de ignição por compressão sobre - alimentado, a fumigação poderia ser realizada antes do turbo-compressor para, mediante o aumento da pressão do ar, atomizar o combustível substituto. Mas, o choque do "spray" de combustível substituto sobre o rotor do compressor, pode ocasionar sérios danos mecânicos ao mesmo [51]. Outro possível local para a instalação do injetor encarregado da dosagem do álcool, seria após o turbo-compressor no coletor de admissão.

As pesquisas referentes a fumigação de álcoois em motores Diesel mostram que para altas cargas de operação, existe um aumento no rendimento térmico com relação ao motor de ignição por compressão original. Já em baixas cargas, este parâmetro diminui à medida que o teor de álcool na mistura aumenta. Normalmente, a fumigação de álcool reduz as emissões de particulados, óxidos de nitrogênio e dióxido de carbono. Mas, cabe ressaltar que existe um aumento considerável nas emissões de hidrocarbonetos não queimados e monóxido de carbono [35].

Na década de 1980 se investigou o comportamento e características da fumigação de diferentes álcoois (metanol, etanol anidro e etanol hidratado) em um motor de ignição por compressão, 6 cilindros, injeção direta e com turbo-compressor [51]. Neste estudo, a máxima taxa de substituição foi 50% v/v, o que garante o funcionamento do processo de combustão com dois combustíveis [52]. Os resultados mostram que, durante o processo de fumigação, as taxas de aumento de pressão foram superiores às de operação com óleo diesel. Isto aconteceu devido à autoignição da carga fumigada, que ocorreu logo após as reações de pré - ignição do óleo diesel, aumentarem a pressão e temperatura no interior do cilindro, propiciando as condições necessárias para a queima do etanol. Embora, neste estudo não se tenha apresentado os limites máximos de taxa de aumento de pressão permitidos pelo motor, sabe-se, por meio de dados estatísticos e experiências prévias, que acima de determinados valores, este procedimento pode ocasionar uma menor durabilidade do motor.

Ainda na década de 1980, outro estudo foi realizado com o objetivo de determinar os efeitos da fumigação dos álcoois combustíveis hidratados

(etanol e metanol, com diferentes teores alcoólicos: 70, 80 e 99,5% v/v) sobre o rendimento térmico, processo de combustão e emissões em um motor ICO monocilíndrico (AVCO Lycoming) com razão de compressão 18:1 [53]. Os testes foram realizados a uma rotação constante de 2400 rpm. A máxima taxa de substituição de energia total dos combustíveis foi limitada a 55%, devido à falha na combustão. A técnica de fumigação utilizada permitiu uma pequena melhora no rendimento térmico nas cargas médias e altas do motor, mas aumentou o atraso da ignição em todas as condições operacionais. As emissões de CO geralmente aumentam com o aumento da quantidade de álcool fumigado, mas não mostrou dependência com a qualidade ou tipo de álcool utilizado, ao contrário das emissões de óxidos de nitrogênio. As emissões de NO_x diminuíram com o aumento do teor de água no álcool fumigado. O material particulado nas emissões foram menores em todas as condições de operação com etanol [54].

Resultados similares aos descritos anteriormente foram observados nos testes de fumigação de etanol hidratado (80 e 99,5% v/v de etanol) em um motor de ignição por compressão com 4 cilindros, injeção direta e turbo-compressor [55]. Os testes foram realizados com diferentes níveis de carga do motor e diferentes rotações (1100, 1500 e 2100 rpm). Verificou-se que, para evitar que as gotas de etanol impactassem com as pás do turbo-compressor, o injetor de etanol, necessariamente, teria que ser instalado à jusante do compressor, na seção de alta pressão do coletor de admissão. Em altas cargas, a máxima substituição de etanol foi limitada pela capacidade de vazão do injetor utilizado. Quanto à eficiência energética, o processo de fumigação do etanol proporcionou nos testes com altas cargas uma ligeira melhora e nas cargas baixas, uma pequena redução. Foram medidas as emissões de CO, NO_x , opacidade, hidrocarbonetos não queimados (HC) e dióxido de carbono (CO_2). A quantidade de hidrocarbonetos não queimados presentes nas emissões, aumentaram conforme aumentou a massa de etanol fumigada, enquanto a quantidade de CO_2 diminuiu ligeiramente. Também foi observada uma redução na temperatura dos gases de escape na operação diesel / etanol.

Em outro estudo foi realizado um teste de fumigação de etanol em um motor de ignição por compressão automotivo (1978 Oldsmobile 5,7 litros V - 8), com injeção direta e razão de compressão de 22,5:1. O principal objetivo deste estudo foi a determinação do efeito da fumigação de etanol no desempenho do motor em diversas condições de operação [56]. A eficiência do motor, as emissões, a produção de fumaça e a ocorrência da detonação, foram os parâmetros utilizados para a avaliação do desempenho do motor. Os testes realizados contemplaram 12 condições de operação em regime constante (4

níveis de carga e 3 rotações: 1500, 1720 e 2000 rpm). Para todas as condições, com exceção dos testes realizados com baixas cargas (1/4 da carga máxima), pequenos incrementos de eficiência térmica foram obtidos como consequência da fumigação. No entanto, a ocorrência da detonação limitou a quantidade máxima de etanol fumigado (50% da energia total dos combustíveis). A detonação foi quantificada mediante a utilização de valores picos de taxa de aumento da pressão no interior do cilindro. É importante mencionar, que as emissões de particulados e NO_x diminuíram para todas as condições testadas em relação aos testes feitos só com óleo diesel.

Trabalhos experimentais e de simulação numérica do processo de fumigação do etanol pré - vaporizado, foram realizados em um motor de ignição por compressão com injeção direta, turbo-compressor e com razão de compressão 15,8:1 [57]. O percentual em massa de etanol fumigado variou de 0 até 80% nos níveis de baixas cargas e de 0 até 50% da plena carga. Para determinar o atraso de ignição, liberação de calor e produção de óxido nítrico, foram utilizados dados de pressão no interior do cilindro. O modelo matemático utilizado na determinação da liberação de calor, divide a câmara de combustão em três zonas homogêneas: duas zonas de mistura combustível - ar e uma terceira zona contendo os produtos da combustão. A mistura ar - etanol foi considerada uniforme através das duas zonas combustível - ar. Se assumiu que o óleo diesel ocupou apenas uma destas zonas. O modelo predisse um aumento do pico da liberação de calor durante a primeira fase da queima com fumigação de etanol, mesmo tendo ocorrido um atraso na combustão. Por causa do processo de fumigação, a duração da combustão diminuiu durante os testes com altas cargas, mas aumentou nas baixas cargas. Através do mecanismo de Zeldovich, o modelo predisse a formação de NO , mas os valores previstos foram sempre maiores aos obtidos experimentalmente.

Um estudo realizado em finais da década de 1980 teve como objetivo, medir os efeitos do metanol fumigado sobre o atraso da ignição e a taxa de liberação de calor em um motor de ignição por compressão monocilíndrico com injeção direta, resfriado a água e razão de compressão 15,5:1 [58]. A massa de etanol fumigada variou de 0 até 150 mg/ciclo, enquanto a massa de óleo diesel foi fixada em 70 mg/ciclo. O ar de admissão foi aquecido por meio de resistências elétricas de tal forma que sua temperatura variou entre 20 e 250°C. Este procedimento teve como objetivos: a compensação de temperatura devido à evaporação do metanol, a melhora da pré - mistura admitida e a geração das condições necessárias no interior do cilindro que beneficiem a autoignição do combustível fumigado. Nos resultados apresentados, o estudo concluiu que o atraso da ignição, nos testes de fumigação, dependem mais de fatores físicos

(formação da mistura), do que dos fatores químicos.

No Brasil, em meados da década de 2000, se avaliou o desempenho e as emissões de um motor de ignição por compressão, com quatro cilindros, aspiração natural, razão de compressão 16:1 e operando com fumigação de etanol hidratado (93% de teor de álcool m/m) [59]. Os testes foram realizados para quatro níveis de carga (25, 50 75 e 100% da plena carga) e três rotações do motor (1800, 2300 e 2800 rpm). Durante os testes de fumigação, somente foram analisadas as condições com máxima substituição energética dos combustíveis. Estes valores variaram de 30% de substituição a 100% da carga a até 60%, no caso de 25% da carga máxima. Nos testes com cargas parciais, foi observado queda da eficiência térmica e aumento médio de 100% e 400% nas concentrações de CO e HC respectivamente, mas a concentração de NO_x diminuiu em 50%

2.2.4

Dupla Injeção Direta

Esta técnica bastante interessante foi apresentada no passado recente como "Injeção piloto Dual Fuel" ou simplesmente "Injeção Dual" [60]. Hoje é denominada ignição por compressão de reatividade controlada (Sigla em inglês RCCI) [61] [3], que é uma combinação de dois sistemas individuais de injeção: um sistema com um combustível de baixo número cetano (álcoois) e outro com um combustível com alto número de cetano (diesel) que é denominado piloto. Nesta técnica, a injeção de ambos combustíveis se dá de forma direta na câmara de combustão. É possível obter taxas de substituição energética de até 90% (em plena carga) e entre 60% a 80% (em cargas parciais) [62]. Sabendo que a miscibilidade entre o álcool e o diesel não é uma preocupação, a qualidade e o conteúdo de água dos álcoois utilizados na dupla injeção não são tão críticos quanto em outras técnicas de uso do álcool em motores Diesel [60].

Por meio da injeção piloto diesel é possível inflamar uma injeção atrasada de álcool, produzindo uma combustão estável e eficiente. Na sequência oposta (injeção de álcool antes da injeção piloto) podem acontecer falhas da combustão, devido ao efeito de esfriamento da câmara, originado pelo alto calor latente de vaporização do etanol e álcoois em geral [39].

Porém, entre as principais desvantagens desta técnica, destacam-se a complexidade e custo de um segundo sistema completo de injeção para o álcool. Motores a diesel devem dispor de um espaço físico suficiente, no cabeçote, para a instalação e orientação correta do segundo injetor na câmara de combustão [39].

Uma investigação conduzida pela EPA (Agência de proteção ambiental

dos Estados Unidos) avaliou as emissões dos gases de escape de um motor de ignição por compressão, com injeção direta, utilizando diesel - etanol e diesel - metanol mediante dupla injeção. Os valores médios dos poluentes foram calculados por meio de dois testes padrões, um ciclo estacionário e um ciclo transiente, independentemente da quantidade de álcool injetado. As emissões de HC aumentaram em 50% e 100% nos ciclos estacionário e transiente, respectivamente. Enquanto as emissões de NO_x diminuíram em 50% e 33% nos testes estacionário e transiente, respectivamente. A quantidade de material particulado diminuiu em 50% para ambos casos [63].

Pesquisadores da Universidade de Wisconsin acharam uma nova aplicação da dupla injeção direta, assim como das injeções múltiplas. Desta vez, injetando simultaneamente dois combustíveis com diferentes números de cetano, ao que eles denominaram nível de reatividade (baixa reatividade = baixo número de cetano e alta reatividade = alto número de cetano). Através deste método, é possível controlar a combustão das fases do modelo RCCI que oferece o potencial de diminuir as emissões de HC e CO, sem sacrificar os benefícios do RCCI: alta eficiência e níveis próximos de zero, tanto nas emissões de NO_x como a de material particulado [64]. Ao utilizar uma combinação de combustíveis com diferentes números de cetano, através do método de fumigação, a variação do número de cetano no cilindro é diretamente proporcional à variação de razão de equivalência, pois cada local que contém combustível de injeção direta vai aumentar tanto em razão de equivalência quanto no número de cetano. Ao injetar diretamente ambos combustíveis, uma melhor distribuição é possível, através do direcionamento do spray, reduzindo desta forma a quantidade de combustível não queimado nas regiões de fenda entre o cilindro e o pistão.

2.2.5

Substituição total do óleo diesel mediante o uso de melhoradores da autoignição

A substituição total do óleo diesel pelo álcool em um processo de combustão de ignição por compressão, consiste na utilização de misturas de álcoois e aditivos melhoradores da autoignição. Esta técnica pode ser realizada sem grandes modificações no motor, embora a quantidade requerida de aditivo (entre 5 e 20%) pode limitar sua aplicação. É por isso que, conjuntamente com a adição de aditivos, devem se realizar algumas modificações no motor, tais como o aumento da razão de compressão e o aquecimento do ar admitido ao processo de combustão [13].

Motores de ignição por compressão que operam diretamente com álcoois

aditivados para elevar o índice de cetano, precisam de algumas mudanças no sistema de injeção. Devido ao menor conteúdo de energia dos álcoois, torna-se necessário fornecer uma maior vazão de combustível para satisfazer os requerimentos de torque e potência à plena carga. Por outro lado, para essas aplicações, os álcoois também devem conter pequenas concentrações de aditivos lubrificantes (como por exemplo, óleo de mamona) e inibidores de corrosão.

O uso de etanol no lugar de óleo diesel em um motor de ignição por compressão requer ora modificação no motor, ora uso de aditivos, para baixar a temperatura de ignição do combustível álcool. Como parte destas pesquisas, há mais de trinta anos, o etanol tem sido utilizado como fonte de energia química na propulsão de veículos com motores ICO.

Em 1981 foi testado um motor ICO, com injeção direta, razão de compressão 17:1, utilizando uma mistura de 88% de etanol hidratado (95% v/v) e 12 % de um melhorador da autoignição (hexil - nitrato) [9]. Os ensaios foram realizados em condições de plena carga, em toda a faixa de rotação. Seus resultados mostraram um melhor rendimento térmico quando o motor, com etanol aditivado, operou em rotações inferiores a 80 % do valor máximo de rotação do motor (relativo ao modo diesel). Quando o motor funcionou entre 40 e 100% da máxima rotação, as emissões de hidrocarbonetos e óxidos de nitrogênio foram menores com o etanol aditivado. Entretanto, nas menores rotações (abaixo de 40 % do valor máximo) as emissões de NO_x do etanol aditivado foram maiores do que no funcionamento a diesel.

Nesse estudo, os pesquisadores também analisaram a decomposição do aditivo nitrogenado no processo de combustão e sua correspondente contribuição na emissão de NO_x . Foi observado que os níveis de NO_x medidos nos testes do motor foram muito menores comparados com aqueles previstos pela completa decomposição do aditivo melhorador da ignição. Em função deste resultado, os pesquisadores afirmaram que o nitrogênio do aditivo (na forma de nitrato) é liberado como N_2 e que o oxigênio do aditivo é utilizado como comburente na combustão.

No Brasil, entre 1979 e 1987, foram realizados diversos testes de campo em ônibus e caminhões (do tipo "treminhão"), equipados com motores de ignição por compressão que utilizavam etanol aditivado como combustível. O objetivo principal era avaliar diferentes melhoradores de ignição no etanol (tais como o etil hexil nitrato e dinitrato de trietileno glicol). Os testes reportaram, comumente, falhas nos bicos injetores. Posteriormente, e devido aos maiores custos operacionais, os veículos foram gradualmente deixados de lado.

A pesquisa ao longo destes últimos anos teve seus frutos. Como já mencionado, em 2006 a União Européia incentivou o Projeto BEST - Bioetanol

para o transporte sustentável, coordenado pela Prefeitura de Estocolmo, na Suécia. Este projeto teve como principal objetivo testar o etanol aditivado em veículos de transporte público em diversas cidades do mundo, entre elas São Paulo [21].

2.3

Combustíveis e aditivos melhoradores da autoignição do etanol

O Objetivo desta pesquisa é a substituição total do óleo diesel no processo de ignição por compressão, mediante a utilização de melhoradores da autoignição do etanol. Para isso foram realizados testes com óleo diesel (referência) e testes com misturas de etanol e melhoradores da autoignição. A seguir é feita uma breve descrição dos combustíveis utilizados assim como também dos melhoradores de ignição que foram misturados ao etanol em diferentes proporções, em trabalhos da literatura.

2.3.1

Óleo Diesel

O óleo diesel é um combustível fóssil, derivado do petróleo, formado principalmente por hidrocarbonetos, composto químico constituído majoritariamente por átomos de hidrogênio e carbono. Em sua composição existe uma pequena quantidade de oxigênio, nitrogênio e enxofre. Este combustível, hoje em dia, é muito utilizado em motores de caminhões, tratores, furgões, locomotivas, automóveis de passeio, ônibus, máquinas de grande porte e embarcações. O mais empregado é o óleo diesel leve, dodecano ($C_{12}H_{26}$ - molécula média), em motores de ignição por compressão que operam em um regime acima de 1200 rpm. Existem, além do óleo leve, outros tipos descritos a seguir [65], [66]:

- Óleo diesel leve $C_{12}H_{26}$;
- Óleo diesel médio $C_{13}H_{28}$;
- Óleo diesel pesado $C_{14}H_{30}$;

A composição química influi diretamente no desempenho do motor e está relacionada com o tipo de petróleo e com os processos utilizados para a sua produção nas refinarias. Este desempenho está condicionado a algumas propriedades do combustível, como por exemplo, a volatilidade, densidade e viscosidade, influenciando diretamente no processo de injeção do combustível, assim como também, na formação de uma mistura de autoignição [28]. O valor da densidade do óleo diesel influi diretamente no processo de combustão, que é observado mediante a quantidade de energia liberada. Diferentes densidades também promovem variações na razão estequiométrica da mistura, originando

variações nas emissões de poluentes. Um combustível mais viscoso pode gerar maiores perdas de carga nos bicos injetores originando uma queda de pressão e a necessidade de um maior acúmulo de combustível na bomba, o que pode ocasionar problemas [28].

Além das propriedades descritas anteriormente, é importante mencionar o número de cetano (NC), propriedade que indica a medida da qualidade de autoignição do óleo diesel. O processo de determinação do número de cetano é realizado mediante testes em um motor monocilíndrico. O teste padrão de medição do número de cetano em combustíveis é feito em motores ASTM CFR Cetano através do método padrão desenvolvido pela ASTM sob o código D 613 [67]. Tal método consiste na comparação da qualidade de ignição de certo combustível sob condições padrão de operação com as de combustíveis de referência, de conhecido número de cetano. Esta comparação é feita variando-se a razão de compressão e a injeção até se atingir 13 graus tanto para o avanço da injeção quanto ao atraso da ignição, ou seja, a combustão tem seu início no PMS. Os combustíveis de pior qualidade necessitam de razões de compressão maiores para que seu atraso de ignição atinja 13 graus. Os combustíveis de referência são misturas feitas a partir do Cetano (nhexadecano) e do Heptametilnonano (HMN) ou alternativamente do T-Fuel e do U-Fuel que são combustíveis padrão com número de cetano conhecido. Compara-se a leitura no volante que controla a razão de compressão nas condições padrão e faz-se uma média ponderada para determinar o número de cetano do combustível em questão [68]. As condições padrões de operação são:

- Rotação: 900 ± 9 rpm.
- Avanço da injeção: 13 graus antes do PMS.
- Pressão da abertura do injetor: 1500 ± 50 psi ($10,3 \pm 0,34$ MPa).
- Vazão de combustível: $13,0 \pm 0,2$ ml/min.
- Temperatura da água de arrefecimento do injetor: $100 \pm 5^\circ\text{F}$ ($38 \pm 3^\circ\text{C}$).
- Temperatura da água de arrefecimento do motor: $212 \pm 3^\circ\text{F}$ ($100 \pm 2^\circ\text{C}$).
- Pressão do óleo lubrificante: 25 a 30 psi (0,17 a 0,20 MPa).
- Temperatura do óleo lubrificante: $135 \pm 15^\circ\text{F}$ ($57 \pm 8^\circ\text{C}$).
- Temperatura do ar de admissão: $150 \pm 1^\circ\text{F}$ ($66 \pm 0,5^\circ\text{C}$).

O número de cetano representa, indiretamente, o intervalo de tempo que leva o combustível desde o momento que é injetado na câmara de combustão até o momento que entra em combustão, processo denominado comumente como atraso da ignição. Portanto, quanto maior é o número de cetano (NC), menor

será o atraso da ignição. Em motores de ignição por compressão, o número de cetano varia em torno de 40 a 60. É importante mencionar que um NC elevado favorece no processo de aquecimento do motor, reduzindo a possibilidade de danos aos pistões, diminuindo, de maneira geral, o nível do ruído do motor e os índices de emissões de poluentes. Um NC abaixo de 40 pode originar perda de potência, maior consumo de combustível e presença de fumaça na descarga [25]. Quando o NC está abaixo do recomendado para o motor, o atraso de ignição é maior, originando a presença de uma maior quantidade de combustível na câmara de combustão, que não queima no momento correto. Como consequência, o motor não opera de forma correta, o que pode gerar um aumento de pressão na câmara de combustão superior aos níveis de projeto do motor, provocando esforços anormais sobre o pistão e oferecendo risco de danos estruturais ao motor [25].

2.3.2 Etanol

O etanol é hoje um produto de diversas aplicações no mercado, comumente utilizado como combustível na forma hidratado ou misturado à gasolina e na atualidade, ao óleo diesel. Este combustível, utilizado nos carros a álcool é incolor, volátil, inflamável e totalmente solúvel em água. É derivado da cana de açúcar ou do amido, entre outros, sendo produzido através da fermentação da sacarose. Comercialmente era conhecido como álcool etílico hidratado combustível (AEHC), onde sua composição química é dada por C_2H_5OH . O álcool anidro, ausente de água, é constituído de 99,3° INPM (porcentagem de álcool em peso ou grau alcoólico) [33]. Nos testes realizados, utilizou-se etanol hidratado, comprado nos postos da Petrobras, para os quais, o grau alcoólico INPM esteve entre 92,6° a 93,8° [34]. O etanol, em relação ao óleo diesel, emite consideravelmente uma menor quantidade de material particulado, devido à maior volatilidade e por possuir uma menor quantidade de carbono [35] [69].

Dificuldade na utilização do etanol em um processo de ignição por compressão

Com o objetivo de prevenir danos aos componentes do motor, favorecendo sempre que possível uma combustão completa, a seguir são citadas algumas limitações que devem ser levadas em consideração na utilização do etanol [28]:

- Possibilidade de contaminação da borracha. Neste caso, há necessidade da troca dos materiais dos componentes.

- Baixo poder calorífico inferior do etanol, 26,865 MJ/kg [70], quando comparado com o óleo diesel, 42,45 MJ/kg [70]. Esta diferença leva a um maior consumo de etanol para fornecer a mesma quantidade de energia do óleo diesel.
- Alta acidez do etanol que possui certa percentagem de água e ácidos. Segundo a ANP, Agência Nacional do Petróleo, a concentração máxima permitida de ácidos é de 30 mg/l de etanol [71]. Apesar de ser baixa, esta concentração tem seu efeito agravado devido à presença da água, o que obriga a realização de tratamentos superficiais em componentes que tenham contato direto com o combustível. Isto já é feito nos motores Otto aqui no Brasil.
- Sendo um fluido higroscópico, este combustível absorve a água com facilidade, onde a consequência é a diminuição do poder calorífico ocasionando um aumento no consumo. Existe um limite de especificações de teor de água que deve ser respeitado no campo.
- Aumento do seu poder corrosivo devido à hidratação do álcool. Com o aumento da hidratação, a durabilidade do coletor de escape e do silencioso é menor quando estes são fabricados em ferro fundido. Os motores ICO devem ser adaptados, assim como os ICE já o são.

2.3.3

Etanol Aditivado - ED95

No projeto BEST foi utilizado o etanol aditivado (ED95 ou Etamax D), que é uma mistura de etanol com um aditivo fabricado pela SEKAB [17]. A SEKAB, firma sueca, é representada no Brasil pela Clariant BU ICS/Industrial Application.

Como se sabe, o sistema de combustão de um motor ICO funciona, basicamente, mediante o controle da temperatura e pressão no interior da câmara de combustão. Portanto, para que o etanol hidratado possa se comportar com as mesmas características de combustão do diesel é necessário adicionar ao mesmo um componente melhorador de ignição. Atualmente, este componente é proveniente da Suécia e, ao chegar ao Brasil via porto de Santos, segue para Paulínia por via rodoviária. Este componente já vem diluído em etanol a uma taxa de 50% em volume, devido às suas características químicas. Uma vez no Brasil, é feita a nova dosagem, de forma que o produto final, denominado Etanol Hidratado ED95 é composto por 95% de Etanol hidratado e 5% de componente "melhorador" de ignição, como mostrado na Figura 2.4

Caracterização do Combustível ED95

O etanol hidratado utilizado na mistura com o componente melhorador de ignição segue o Regulamento Técnico ANP N° 3/2011 da Resolução ANP N° 7, DE 9.2.2011 - DOU 10.2.2011. Na Tabela 2.1 mostra-se a composição deste aditivo e na Tabela 2.2 apresenta-se as propriedades físicas e químicas dos componentes do ED95. Ambas tabelas apresentam dados fornecidos pela Raízen.

Tabela 2.1: Composição do Aditivo

Elementos	CAS N°	EG N°	Concentração % de peso	Letras símbolo; R Frases*
Etanol	64-17-5	200-578-6	40-50	F;R11
Beraid	61694-55-0	500-075-04	40-50	
Isobutano	78-83-1	201-148-0	3-6	R10 Xi; R37/38 R41 R67
Morpholin	110-91-8	203-815-1	< 0,2	R10 R20/21/22 C; R34
Lubrificante	25307-17-9	246-807-3	7-9	R22 C; R34 N; R50**

Fonte: Raízen.

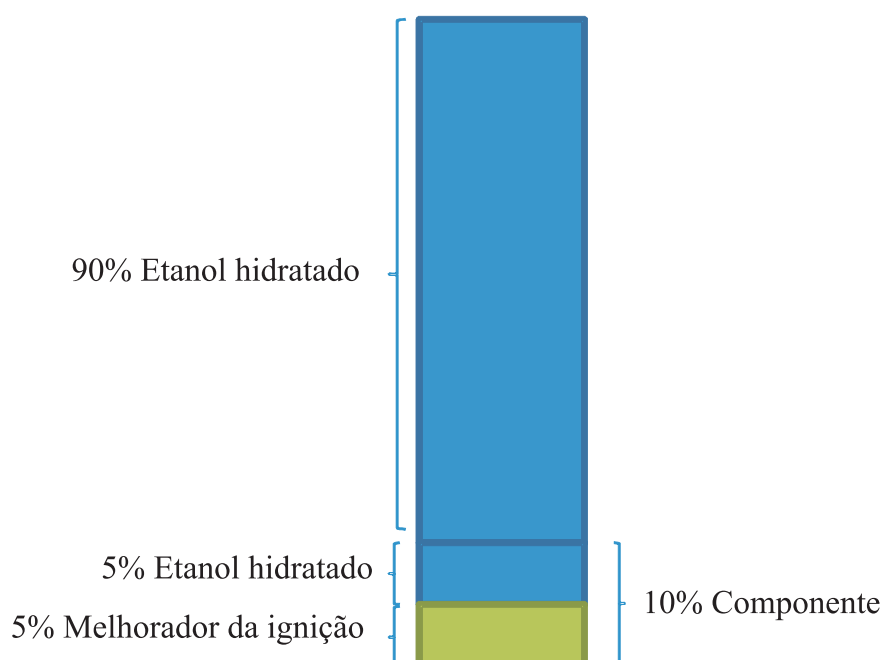


Figura 2.4: Composição do ED 95.

Fonte: Raízen

Tabela 2.2: Propriedades físicas e químicas dos compostos do ED95

Propriedade	Etanol	Beraid	Lubrificante
Solubilidade em água	Totalmente	Totalmente	Emulsivo
Solubilidade em solvente orgânico	O máximo	No Etanol	No Etanol
Ponto de Fulgor (°C)	+12	>100	<100
Ponto de Ebulição (°C)	78,5	>100	>300
Pressão de Vapor (kPa)	15,7	-	<0,1 hPa(20°C)
Faixa de Inflamabilidade (°C)	+12 à +40	-	-
Densidade (g/cm³)	0,808	1,140	9,905
Temperatura de auto-ignição (°C)	363	-	-

Fonte: Raízen.

Visto que um dos objetivos do presente projeto é o desenvolvimento de um novo combustível entrou-se em contato com representantes da Clariant para América Latina. Esta empresa poderia fornecer uma amostra do aditivo, mas com um contrato que exigia confidencialidade e disponibilização de todos os resultados dos testes e futuras melhorias. Como não se chegou a um acordo, buscou-se o combustível ED95 nos postos de abastecimento das firmas de transporte público em São Paulo. A Metropolitana São Paulo, por encargo da Raízen, firma que produz o ED95, disponibilizou uma amostra de 15 litros deste Etanol Aditivado.

O combustível foi inicialmente caracterizado para verificar seu atendimento ao regulamento ANP N° 05 de 2011, foram utilizadas as especificações ASTM/ABNT recomendadas pela ABNT. A Tabela 2.3 apresenta os resultados obtidos.

Tabela 2.3: Principais parâmetros analisados e método de ensaio empregado na caracterização do combustível ED95.

Característica	Norma utilizada	Resultado
Acidez Total, mg/L	ABNT NBR 9866	<0,5
Massa Específica a 20°C, g/mL	ABNT D4052	0,8247
Teor Alcoólico, °INPI	ASTM D 4052	87,4
Goma Lavada	ASTM D 381	4650
Determinação pH a 20°C	ABNT NBR 10891	8,7
Condutividade Elétrica, $\mu S/m$ a 20°C	ABNT NBR 10547	1337

Foi retirada uma alíquota de 100 ml de combustível identificado por "ED95". Essa amostra foi colocada num balão para destilação simples. O processo de destilação foi realizado até que não mais restasse etanol no produto a ser destilado. A unidade foi mantida nessa condição por mais 5 minutos. Tendo sido considerado então o resíduo do processo de destilação como sendo o aditivo presente nesse combustível. O processo foi realizado em duplicata. A Tabela 2.4 apresenta os valores em percentual de massa obtidos para as amostras testadas.

As etapas seguintes tiveram como objetivo, identificar os compostos presentes no aditivo isolado. Foram realizadas três diferentes técnicas para identificação dos compostos presentes conforme descrito na Tabela 2.5. Os resultados parciais obtidos foram:

- A separação por destilação simples fornece um líquido viscoso amarelo que representa cerca de 6% em peso de etanol aditivado.
- O espectro UV-Visível não indicou nenhuma absorção na faixa de 200-800 nm sugerindo que não existência de componente insaturado no resíduo proveniente da destilação.
- Os resultados do espectro de IV sugere a presença de grupo hidroxila e de compostos alifáticos saturados.
- O espectro de RMN confirma a ausência de compostos químicos insaturados e indica a existência de muitos grupos C-H, alifáticos, em especial o grupo -O-CH₂-CH₂-O-
- Os resultados sugerem um tipo de composto derivado do "Polietilenoglicol".

Tabela 2.4: Valores de massa de etanol aditivado, resíduo obtido e % final após os ensaios de destilação simples.

Teste	Massa de etanol aditivado (g)	Massa de resíduo (g)	% em massa do resíduo
1	81,71	4,97	6,09
2	87,92	4,79	5,84

Tabela 2.5: Valores de massa de etanol aditivado, resíduo obtido e % final após os ensaios de destilação simples.

Procedimento	Equipamento utilizado
Espectroscopia de Infravermelho (IV)	Perkin Elmer, FT-IR Spectrophometer-400
Espectroscopia de Ultravioleta/Visível	Cary 50 Scan, UV/Visible Spectrophotometer
Ressonância Nuclear Magnética	Varian VNMRs 300MHz NMR Spectrometer

2.3.4

Misturas de Etanol e melhoradores da autoignição

Para a possível obtenção do "Aditivo" melhorador da autoignição do etanol, foi realizada uma revisão nas patentes existentes, dentre as quais se ressalta a de nº WO 95/05437 [16]. Nesta patente mencionam-se diversos compostos químicos que podem desempenhar a função de melhorador da ignição do etanol. A partir do apresentado na patente foi realizada uma revisão bibliográfica conforme se apresenta abaixo.

O uso de etanol em substituição ao óleo diesel em motor de ignição por compressão requer ora modificação no motor, ora uso de aditivos para baixar a temperatura de ignição do combustível - etanol. Os aditivos são agentes químicos que baixam a temperatura de ignição do combustível. Os agentes químicos que melhoram as propriedades de ignição do combustível são geralmente derivados de nitratos de alquilas, um dos mais populares é o nitrato de 2-etilhexila, conhecido como EHN [$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2(\text{CH}_3\text{CH}_2)\text{CHCH}_2\text{ONO}_2$]. O EHN possui odor forte, é tóxico e pode ser hidrolisado com formação de ácido nítrico e 2-etilhexanol quando armazenado por longo tempo e, em especial, sob alta temperatura. A hidrólise pode causar o aumento de acidez no ambiente, que implicaria no risco de corrosão, etc. Outro problema do EHN é decorrente da presença do átomo de nitrogênio, que pode causar o aumento de emissão de óxido de nitrogênio para o ambiente, originando um problema ambiental [72]. O uso de poliol contendo 6~50 óxido de alquilenos, solúvel em água, como aditivo alternativo tem ganhado destaque nos últimos anos.

2.3.4.1

Polietileno glicol

Polietileno glicol é um álcool com cadeia poliéster, cuja fórmula molecular pode ser apresentada na seguinte figura:

Polietileno - glicol (PEG) também conhecido como PEO (óxido de polietileno), é formado por oligômeros ou polímeros de óxido de etileno. Dependendo

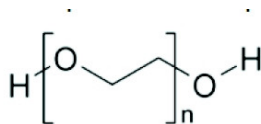


Figura 2.5: Fórmula molecular do polietileno glicol.

do seu peso molecular, o produto também pode ser chamado de Carbowax. Os oligômeros e polímeros, com massa molecular abaixo de 20.000, são representados por PEG. Os polímeros com massa molecular acima de 20.000 são representados por PEO. Eles são produtos obtidos pela polimerização do óxido de etileno, e estão disponíveis, comercialmente, com peso molecular variando de 300 a 10.000.000. Os PEG e PEO possuem aplicações importantes, devido a sua propriedade física (viscosidade) e, devido às cadeias polietoxilas, suas propriedades químicas são quase idênticas. PEG é solúvel em água, metanol, etanol, benzeno e diclorometano; insolúvel em éter etílico e hexano. PEG pode acoplar com moléculas hidrofóbicas para formar surfactantes não iônicos. PEG também é disponível nas seguintes geometrias:

- PEG ramificado possuindo de 3 a 10 cadeias de polietoxila, originado de carbonos centrais.
- PEG estrelado possuindo de 10 a 100 cadeias, originado de carbonos centrais.
- PEG com cadeias polietoxila múltipla, originado de um esqueleto de polímero.

O produto geralmente é representado por seu nome e, logo em seguida, um número indicando seu peso molecular médio, como por exemplo, um PEG 400 representa $n=9$, assim, o PEG 400 possui um peso molecular médio por volta de 400. A Tabela 2.6 apresenta a viscosidade de diversos PEG.

Alguns testes já foram realizados em motor ICO modificado, de apenas um cilindro, super-carregado, com velocidade de 40 rps, razão de compressão 20:1 e com ar de entrada pré-aquecido a 160, 180 ou 200°C, conforme descrito em [73] e [16].

O atraso da ignição do combustível é determinada entre o momento de injeção e o início de sua combustão. Na patente nº WO 95/05437, os aditivos testados são: 1) etoxilato de glicerol 600; 2) etoxilato de glicerol 800; 3) etoxilato de trimetilolprapano 400; 4) etoxilato de trimetilolprapano 600; 5) etoxilato de trimetilolprapano 930; 6) etoxilato de di(trimetilolprapano) 1300; 7) etoxilato de sorbitol 980; 8) etoxilato de pentaeritritol 600 e 9) polietilenoglicol 600. A Tabela 2.8 mostra os resultados dos testes.

Tabela 2.6: Viscosidade de alguns PEG a $100\text{C} \pm 0,3^\circ\text{C}$.

Peso molecular médio	Viscosidade (Pa.s)	Peso molecular médio	Viscosidade (Pa.s)
200	4,1~4,8	800	12,5~14,5
300	5,4~6,4	900	15,0~17,0
400	6,8~8,0	1000	16,0~19,0
500	8,3~9,6	1100	18,0~22,0
600	9,9~11,3	1200	20,0~24,5

Fonte: Avaliação e pesquisa bibliográfica sobre aditivos para Etanol Combustível em Motor de ignição por compressão [73], [74] .

Tabela 2.7: Composição de combustível testado em motor de ignição por compressão

Misturas	Componentes (% pelo peso)		
	Etanol	Água	Aditivo
I	94,0	5,0	1,0
II	91,3	4,8	3,9
III	88,8	4,7	6,5

Fonte: Avaliação e pesquisa bibliográfica sobre aditivos para Etanol Combustível em Motor de ignição por compressão [73], [16].

Tabela 2.8: Resultados obtidos para cada aditivo.

	Atraso da ignição (ms)								
	160 °C			180°C			200°C		
Combustível	I	II	II	I	II	II	I	II	II
1	0,85	0,62	0,34	0,66	0,46	0,25	0,42	0,34	0,23
2	0,82	0,63	0,36	0,59	0,41	0,28	0,43	0,28	0,24
3	0,84	0,64	0,45	0,59	0,41	0,33	0,43	0,30	0,26
4	0,82	0,66	0,43	0,62	0,42	0,30	0,47	0,32	0,26
5	0,88	0,63	0,34	0,65	0,42	0,26	0,44	0,32	0,24
6	0,84	0,61	0,35	0,61	0,40	0,28	0,42	0,32	0,23
7	0,85	0,71	0,39	0,65	0,44	0,27	0,43	0,31	0,23
8	0,90	0,71	0,39	0,62	0,46	0,29	0,41	0,29	0,23
9	0,95	0,67	0,42	0,66	0,47	0,35	0,47	0,34	0,26

Fonte: Avaliação e pesquisa bibliográfica sobre aditivos para Etanol Combustível em Motor de ignição por compressão [73], [16].

A Tabela 2.8 mostra que, quando a temperatura do ar de admissão é maior, o atraso da ignição é menor. também é importante destacar que, quanto maior é o percentual de aditivo na mistura, o atraso da ignição diminui.

2.3.4.2

n-Butanol

O Butanol, em geral, é um álcool, de origem não-renovável, que possui aplicações diversas na indústria química. Portanto, nos últimos anos, diversas pesquisas têm sido desenvolvidas no Brasil e no mundo visando à produção do biobutanol, isto é, o butanol de origem renovável. Há bastante tempo, utiliza-se o butanol em indústrias químicas como matéria prima para produtos químicos diversos. Porém, o volume atualmente é pequeno quando comparado aos insumos químicos mais conhecidos. Mediante as pesquisas relacionadas à produção de biobutanol, um mercado pode surgir, devido ao fato de que este insumo químico pode ser utilizado conferindo um caráter renovável aos produtos finais. As pesquisas sobre a produção, utilização e difusão dos biocombustíveis têm aumentado consideravelmente, não apenas no Brasil, mas também em outros países. Ao contrário do etanol, as pesquisas relacionadas ao uso do butanol como combustível veicular ainda se encontram em estágio embrionário.

Os álcoois são definidos pela presença de um grupo hidroxil (-OH) ligado a um dos átomos de carbono. O butanol tem uma estrutura de 4 carbonos e os átomos de carbono podem formar-se tanto em uma cadeia linear como em uma cadeia ramificada, resultando em diferentes propriedades. O butanol, também chamado álcool butílico, é um líquido volátil e extremamente inflamável na presença de alguma faísca. Existem diversos isômeros, com base na estrutura da cadeia de carbono e localização do grupo hidroxila. 1-Butanol, também conhecido como n-butanol, tem uma estrutura de cadeia linear com o grupo -OH no átomo de carbono terminal. 2-butanol, também conhecido como sec-butanol, é também, um álcool de cadeia linear, mas com o grupo -OH em um carbono interno. Iso-butanol é um isômero ramificado com o grupo -OH no átomo de carbono terminal e terc-butanol refere-se ao isômero ramificado com o grupo -OH em um carbono interno. Algumas propriedades físico - químicas destes isômeros são mostradas na Tabela 2.9.

Embora as propriedades dos isômeros de butanol sejam diferentes, quanto ao índice de octano, ponto de ebulição, viscosidade, etc., as principais aplicações são semelhantes em alguns aspectos, tal como sendo usados como solventes, agentes de limpeza industrial, ou aditivos da gasolina. Todos estes isômeros de butanol podem ser produzidos a partir de combustíveis fósseis,

Tabela 2.9: Dados sobre os isômeros do butanol

Propriedade	n-butanol	iso-butanol	sec-butanol	tert-butanol
Densidade à 20 °C (g/cm ³)	0,81	0,802	0,806	0,781
Viscosidade à 25 °C (mPa.s)	2,544	4,312	3,096	-
Ponto de ebulição (°C)	118	108	99	82
Solubilidade em água (g/100 ml)	7,7	8	12,5	Miscível
Ponto de fulgor (°C)	35	28	24	11
Temperatura de autoignição (°C)	343	415,6	406,1	477,8
Índice de octanagem MON	78	94	-	89
Índice de octanagem RON	96	113	-	105

Fonte: GESTIS Substance Database [75].

por diferentes métodos. Mas o butanol produzido a partir de biomassa geralmente assume a estrutura da molécula de cadeia linear, qual seja, o n-butanol.

As propriedades físicas e químicas da gasolina, do óleo diesel, do Etamax D (ED95) e do n-butanol são listados na Tabela 2.10. Estas propriedades indicam que o n-butanol tem um potencial para ultrapassar os inconvenientes trazidos pelos álcoois de baixo teor de carbono [70].

Entre as vantagens e desvantagens na utilização do n-butanol, podemos citar as seguintes:

- Alto poder calorífico inferior em relação ao etanol. Normalmente o poder calorífico inferior dos álcoois aumenta com o incremento de número de átomos de carbono. O n-butanol é um álcool com 4 carbonos, dobrando a quantidade de carbonos quando comparado ao etanol. O butanol tem um conteúdo energético de 33,81 MJ/kg, 26% a mais do que o conteúdo energético do etanol, que é de apenas 26,8 MJ/kg.
- Baixa volatilidade. A volatilidade (pressão de saturação) dos álcoois diminui com o aumento do número de átomos de carbonos presentes na molécula. Isto significa que o n-butanol terá menos tendência à cavitação e problemas de bloqueio de vapor.
- Maior poder de autoignição em relação ao etanol. Como o calor latente de vaporização é quase a metade do que do etanol, um motor que funciona com butanol deve ter maior facilidade para dar partida a frio que um veículo usando etanol ou metanol. Além disso, a temperatura de autoignição do n-butanol é menor do que do etanol, o que também resulta

Tabela 2.10: Propriedades dos combustíveis.

Propriedades	Gasolina	Diesel	ED95	Etanol	n-Butanol
Formula molecular	C ₄ -C ₁₂	C ₁₂ -C ₂₅	-	C ₂ H ₅ OH	C ₄ H ₉ OH
Numero de Cetano	0-10	40-55	10	8	25
Numero de Octano	80-99	20-30	-	108	96
Densidade (g/ml) a 20 °C	0,72-0,78	0,82-0,86	0,81-0,83	0,79	0,808
Temperatura de autoignição (°C)	~300	~210	-	363	343
Ponto de fulgor (°C)	-45 a 38	65 a 88	12	8	35
Poder calorífico inferior (MJ/kg)	42,7	42,5	24,7	26,8	33,81
Ponto de ebulição (°C)	25-215	180-370	-	78,4	117,7
Relação estequiométrica	14,7	14,3	-	9,02	11,21
Calor latente vap. (kJ/kg) at 25 °C	380-500	270	-	904	582
Limite de inflamabilidade (%vol.)	0,6-8	1,5-7,6	-	4,3-19	1,4-11,2
Pressão de sat. (kPa) a 38 °C	31,01	1,86	-	13,8	2,27
Viscosidade (mm ² /s) a 40 °C	0,4-0,8 (20 °C)	1,9-4,1	-	1,08	2,54

Fonte: Specification of alcohols and conventional fossil fuels [70], Selected properties of SEKAB's specification for Etamax DTM and Swedish SS 15 54 37 standard for ethanol used in high-speed diesel engines [76].

em menores problemas de ignição na partida em frio ou em condições de baixa carga. Um maior NC facilita a ignição em motores ICO, assim também, um menor calor latente de vaporização facilita a evaporação e mistura com o ar, facilitando a ignição.

- Viscosidade maior. A viscosidade dos álcoois aumenta conforme aumenta com cadeias de carbonos mais longas. Por esta razão, o butanol é usado como uma alternativa para álcoois com cadeias mais curtas quando se deseja um solvente mais viscoso. A viscosidade cinemática do butanol é maior do que da gasolina e aproximadamente similar à do óleo diesel, portanto, uma mistura que utilize butanol não irá provocar os mesmos problemas de desgaste potenciais em sistemas de injeção diesel devido a uma lubrificação insuficiente que podem ocorrer com os álcoois de cadeias

curtas.

- Mais seguro. Como o butanol tem um ponto de pressão mais baixa e um ponto de fulgor mais elevado em relação ao etanol, é um combustível mais seguro para usar em altas temperaturas.
- Menos corrosivo que o etanol.

Como pode ser observado na Tabela 2.10 e descrito nas vantagens e desvantagens do uso do n-butanol, este produto pode ser usado como um melhorador da autoignição para o etanol, em sistemas de ignição por compressão.

N-butanol hoje em dia é produzido em diversas partes do mundo. A Figura 2.6 apresenta as cotas do mercado em 2014 (produção). Em Abril de 2010 se tinha uma produção de 1.947 (10^3 ton/ano) [77]. Aqui no Brasil, os focos de produção e pesquisa com relação ao butanol e suas novas vertentes químicas e tecnológicas, assim como suas novas aplicações, ainda são restritos e específicos, mas a cada ano os incentivos e investimentos aumentam. A produção do butanol e biobutanol é representada pela ELEKEIROZ S.A. e pela Hc Sucroquímica [78]. Hoje em dia as pesquisas estão direcionadas à produção de biobutanol (biocombustível) proveniente da biomassa, como a cana de açúcar ou palha de cereais (trigo, cevada, milho), entre outras matérias primas.

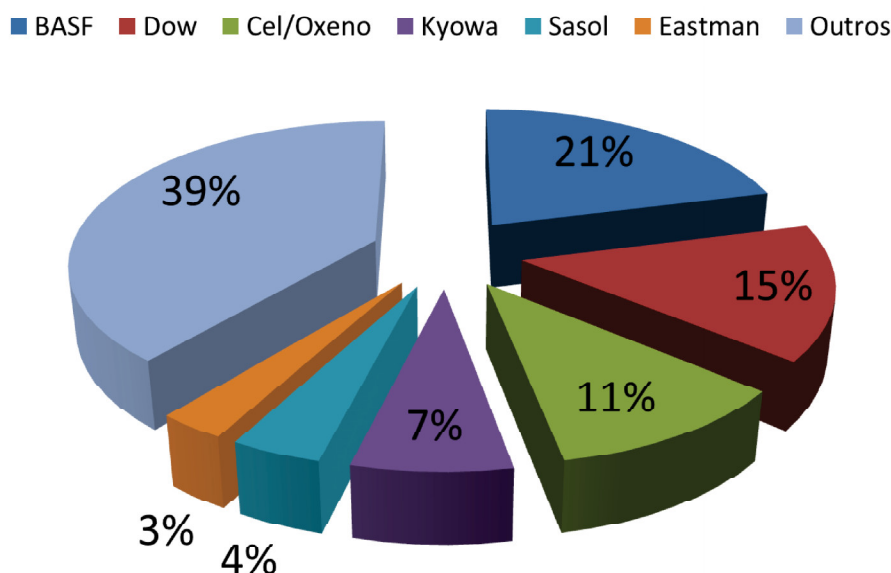


Figura 2.6: Cota do mercado em 2014 para n-butanol.

Fonte: Market Share of Leading n-Butanol Producers [79].

O biobutanol é obtido de maneira industrial, mediante a utilização de bactérias do gênero *Clostridium*, que são as encarregadas de realizar a fermentação dos açúcares para a produção do biobutanol. No caso de matérias primas residuais, como as palhas em geral, elas devem ser pré-tratadas e hidrolisadas. A hidrólise utiliza enzimas que separam a celulose e a hemicelulose, de tal forma que se liberam os açúcares simples. Assim, a bactéria pode fermentá-los em três produtos: Acetona, Butanol e Etanol (ABE). Normalmente, os quatro passos preparatórios (pré-tratamento, hidrólise, fermentação e recuperação) são realizados separadamente. No caso da palha de trigo, ela deve ser pré-diluída com ácido sulfúrico, fermentada em um biorreator contendo três diferentes enzimas e uma cultura de *Clostridium – beijerinckii*. Desta forma, as enzimas e as bactérias atuam simultaneamente, reduzindo o custo industrial [77].

2.3.5

Métodos de Modelagem

A modelagem de fenômenos físico-químicos de processos complexos são condições de partidas muito importantes. O modelo é feito mediante a utilização de hipóteses simplificadoras de forma que seja fácil o entendimento das causas e consequências de um determinado processo termodinâmico. Hoje em dia a sua utilização é fundamental e amplamente empregada ao redor do mundo.

Modelar, em um contexto geral, engloba a utilização de modelos matemáticos para descrever um processo ou fenômeno físico de um sistema particular. O objetivo é adquirir um contexto inicial da natureza do problema. Mais especificamente, aplicar o modelo significa entender os complexos fenômenos físico-químicos que estão estritamente vinculados à conservação de massa, momentum e transporte de energia. O resultado é a conversão da energia química contida no combustível em energia mecânica (trabalho útil), que é gerado mediante a expansão do gás na câmara de combustão. É importante mencionar, que as equações utilizadas são, na maioria das vezes, muito complexas, onde o número de incógnitas é bem maior que o número de equações. Isto leva à adoção de hipóteses, com a finalidade de conseguir solucionar o problema. Cabe mencionar que, para a resolução do problema, muitas vezes surge a necessidade da utilização de softwares que possibilitem a utilização de processos iterativos.

Uma das maiores dificuldades dos pesquisadores é a elaboração correta de um modelo. Os resultados encontrados até hoje fornecem uma boa aproximação no processo de queima como um todo. Mas, cabe mencionar que, devido à

turbulência do escoamento dos gases no interior da câmara de combustão, há dificuldades no perfeito entendimento do fenômeno. Isto leva à utilização de submodelos de turbulência que, por fim, geram bons resultados, mas aproximados. Como já descrito anteriormente, diversos trabalhos experimentais e numéricos já foram desenvolvidos até hoje, em bancadas dinamométricas e softwares computacionais, respectivamente. É importante mencionar que para este último, John B. Heywood [23], divide a análise numérica em três categorias, nas quais o nível de complexidade aumenta conforme se opte por modelos mais robustos. Os modelos descritos são:

- Modelo zero dimensional (utilizado);
- Quase dimensional;
- Multi dimensional;

A simulação numérica tem se consagrado como uma ferramenta importantíssima, servindo de suporte nos projetos de motores. O objetivo é investigar os fenômenos físico-químicos decorrentes do processo de combustão em sistemas de ignição por compressão. Mas, é importante mencionar alguns métodos para sua correta e coerente aplicação:

- Identificar o que se deseja simular, isto é, um equipamento único ou um sistema, para posteriormente determinar os objetivos específicos;
- Sintetizar os processos, com a finalidade de poder determinar o comportamento dos escoamentos de fluido;
- Uma vez entendidos os processos, pode ser realizada a modelagem matemática, obedecendo às leis que governam os fenômenos;
- Solução numérica, nesta etapa há de se ter os números de incógnitas e equações iguais, mediante a adoção de hipóteses e premissas;
- Seleção de um código computacional (software), para gerar as subrotinas e obter os resultados;
- Validação dos resultados com resultados experimentais, com a finalidade de avaliar a coerência dos valores obtidos;
- Utilizar o código computacional após confirmação dos resultados;
- E, finalmente, elaborar o relatório final, apresentando o desenvolvimento envolvido no trabalho, buscando melhorias contínuas.

Mediante a utilização das etapas acima mencionadas, o objetivo é entender qual é o escopo de trabalho que será realizado, qual é o investimento inicial para viabilizar o projeto e finalmente determinar o prazo de execução do

mesmo. É importante mencionar, pelo fato da sua importância, que a análise numérica não substitui os trabalhos experimentais e, é sim, uma ferramenta extremamente importante que pode ser utilizada de forma paralela ao desenvolvimento dos experimentos. O objetivo reside em entender com maior detalhe teórico, os eventos que acontecem como um todo, eliminar configurações inadequadas e reduzir número de ensaios experimentais, custos e prazos dos projetos.