

2 Revisão bibliográfica

A Revisão Bibliográfica foi realizada com o objetivo de realçar os diferentes aspectos, estudos 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: modelagem computacional da combustão em motores de ignição por centelha, bem como da autonomia e do desempenho de veículos do ciclo Otto. Também foram identificadas limitações e lacunas existentes desde as pesquisas científicas até a aplicação final.

2.1 Combustão em motores

2.1.1 Combustíveis

Os 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 temperaturas e pressões. O desempenho do motor é o resultado da interação entre estes diversos fenômenos, influenciados pelas características e propriedades dos combustíveis. A relação dos principais componentes presentes nos combustíveis com as características de combustão e parâmetros de desempenho dos motores é um campo fértil para investigações.

A gasolina é uma mistura complexa, composta por centenas de componentes, em pequenas proporções, provenientes dos processos de refino do petróleo (Machado, 2007). Na busca de formulações simplificadas que representem o comportamento do combustível original, formulações específicas, conhecidas como formulações reduzidas, são estabelecidas utilizando um número pequeno de componentes, presentes em combustíveis comerciais (Machado, 2012). Formulações reduzidas são interessantes, pois limitam a complexidade físico-química, facilitam o entendimento dos processos fundamentais envolvidos e possibilitam a representação do combustível em programas computacionais de simulação de motores de combustão interna, com menor custo computacional.

Hoje, esses programas apresentam limitações quanto à representatividade dos combustíveis, restringindo sua aplicabilidade como ferramenta para desenvolvimento de combustíveis.

Machado (2012) realiza ampla pesquisa bibliográfica sobre a aplicação de formulações reduzidas para o estudo da combustão em motores de combustão interna. Em seu trabalho são citadas as formulações reduzidas mais simples, que consistem de apenas um componente. Por exemplo, o iso-octano é frequentemente utilizado para representar a gasolina (Heywood, 1988; Ferguson, 1986). 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, 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 por serem representantes das principais classes de hidrocarbonetos presentes na gasolina: as parafinas e os aromáticos.

Andrae (2008), Wang et al. (2013) e Zhong & Zheng (2014) apresentaram modelos detalhados de cinética química para descrever a autoignição de formulações reduzidas consistindo de iso-octano, n-heptano, tolueno, diisobutileno e etanol. As previsões dos modelos desenvolvidos foram satisfatoriamente comparadas com dados experimentais de atraso de ignição de formulações reduzidas de gasolinas em tubo de choque, para várias condições de temperatura e pressão.

Cai & Pitsch (2015) adaptaram o modelo publicado por Narayanaswamy et al. (2010) e desenvolveram um mecanismo cinético validado com sucesso contra resultados experimentais de atraso de ignição e velocidade de queima obtidos em reatores para componentes puros, misturas binárias, ternárias e quaternárias de n-heptano, iso-octano, tolueno e etanol para um grande número de condições relevantes.

Abianeh et al. (2015) apresentaram modelo desenvolvido com base em uma compilação de mecanismos cinéticos já disponíveis, obtendo resultados adequados para o atraso de ignição e a velocidade de queima em diferentes condições de

temperatura e pressão, para uma formulação reduzida contendo sete componentes não oxigenados. O modelo resultou em curvas de pressão com margens de erro aceitáveis em relação às curvas experimentais obtidas em máquina de compressão rápida.

Conforme visto, os estudos de cinética química estão baseados em experimentos conduzidos em diferentes equipamentos, tais como tubos de choque, máquinas de compressão rápida e reatores específicos, em diferentes condições termodinâmicas. Na literatura existem poucas correlações entre o desempenho de formulações reduzidas em experimentos mais controlados e a habilidade da formulação reduzida para reproduzir o desempenho da gasolina no motor. Além disso, atualmente, o desempenho e o comportamento de queima de formulações reduzidas nos motores de combustão interna modernos não são bem conhecidos.

As pesquisas e os 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; Kalghatgi et al., 2014 e 2015). As características da combustão são avaliadas principalmente pelos testes de octanagem, sendo a correlação com motor comercial muitas vezes limitada a esta propriedade. A octanagem pode ser determinada pelos métodos *RON* (*Research Octane Number*), que simula a situação em que o motor está carregado e em baixa rotação e *MON* (*Motor Octane Number*) que avalia a situação em que o motor está em plena carga e em alta rotação. Estes ensaios são regidos, respectivamente, pelas normas *ASTM D2699* e *ASTM D2700* (*ASTM*, 2009a, 2009b).

Solaka et al. (2013) estudou os efeitos de dezessete formulações reduzidas de gasolina, contendo n-heptano, iso-octano, tolueno e etanol, no atraso de ignição utilizando um motor comercial do ciclo diesel com somente um dos cilindros em funcionamento. Combustíveis com maior octanagem *RON* resultaram em maiores atrasos de ignição. 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 de um motor comercial.

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, além daqueles levantados pelo trabalho de Machado (2012). Conforme já explanado, este entendimento é importante para o desenvolvimento de combustíveis em geral, incluindo formulações para aplicações específicas, como por exemplo, competições automotivas.

2.1.2 Simulação de motores

O estudo e a modelagem de motores podem ser encontrados nos livros técnicos especializados, dentre os quais importantes referências são: Taylor (1988); 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.

Machado (2012) sintetiza a classificação de modelos utilizados em simulações de motores de combustão interna com base nas referências de Heywood (1988), Stone (1995), Barros (2003) e Melo (2007) dividindo estes em quatro grupos, descritos a seguir. 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 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).

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).

Barros (2003) desenvolveu modelagem computacional para predição do desempenho (potência, torque e consumo específico) de motores de ignição por centelha. 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.

Existem programas computacionais comerciais destinados à simulação completa de motores, dentre os quais se podem citar o *BOOST* e o *FIRE* (AVL, 2015), desenvolvidos pela AVL, o programa *GTPOWER (Gamma Technologies Inc., 2015)*, desenvolvido pela *Gamma Technologies*, o *WAVE* e o *VECTIS (Ricardo Plc., 2015)*, desenvolvidos pela *Ricardo*, o *LMS Imagine.Lab*, que contém módulos uni e tridimensionais, pertencente à *Siemens* e desenvolvido em conjunto com o *IFPEN (IFP Energies Nouvelles, 2015)*, entre outros. Os programas *BOOST*, *GTPOWER*, *WAVE*, o *LMS Imagine.Lab* e outros programas unidimensionais são

utilizados para cálculos mais sistêmicos, auxiliando no desenvolvimento de motores. Na maioria dos casos, resolvem somente as equações de conservação de massa e energia dentro do cilindro. Utilizam modelos de combustão onde a taxa de queima é previamente definida, normalmente a partir de dados experimentais. O *FIRE*, o módulo 3D do *GTPOWER*, o *VECTIS*, o *LMS Imagine.Lab* e outros programas multidimensionais resolvem as equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento dentro do cilindro. Utilizam modelo de combustão que propaga a chama turbulenta no interior do cilindro. Os custos computacionais dos programas multidimensionais são bastante elevados.

2.1.3 Modelos de combustão em motores

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. 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 simulação da curva de pressão no interior do cilindro durante os tempos de admissão e expansão, 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 curva de pressão. 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.

2.1.3.1 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. A pressão na câmara de combustão é modelada como uniforme, porém a temperatura e a 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.

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, γ , 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, θ , e θ_{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.

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.

Melo (2007) e Melo et al. (2007) apresentam modelagem uma zona, adotando a Lei de Wiebe, de motor multicomcombustível adaptado para operar também com gás natural a partir de um kit de conversão. A modelagem foi capaz de reproduzir a curva de pressão de combustão com boa precisão para os diferentes combustíveis em diferentes condições operacionais. Foram encontradas diferenças percentuais menores que 4% entre as pressões máximas experimentais e simuladas. Os parâmetros a e m foram ajustados em função dos dados experimentais de cada combustível (gasolina, etanol hidratado e gás natural).

Melo et al. (2012) utilizaram um modelo de combustão de duas zonas e lei de Wiebe, com transferência de calor por Woschini (1967), para diferentes misturas gasolina-etanol, em diferentes condições operacionais do motor. Os resultados modelados demonstraram boa correlação com os dados experimentais, com a pressão máxima e *IMEP* simulados apresentando variações percentuais menores que 5% em relação aos experimentos.

Kim et al. (2013) realizaram simulações numéricas para observar a relação entre a fase da combustão e a dinâmica do pistão em um motor de pistão livre. O modelo de Wiebe foi utilizado para simular o processo de combustão. Os parâmetros de combustão, como a sua duração e o avanço de ignição, foram variados considerando diferentes velocidades iniciais de pistão no curso de compressão. A fração de massa queimada no PMS mostrou uma relação linear com os valores de velocidade iniciais do pistão, o que fornece uma ideia geral de como variar o avanço de ignição sob uma determinada condição de velocidade inicial do pistão para alcançar a melhor eficiência de conversão da combustão.

Ashish (2014) apresentou um modelo zero dimensional de uma zona baseado na lei de Wiebe, com uso do modelo de Annand (1963) para as perdas convectivas. As curvas de pressão resultaram em diferenças entre 1% e 6% em relação aos valores experimentais.

2.1.3.2 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 da 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 2.1.

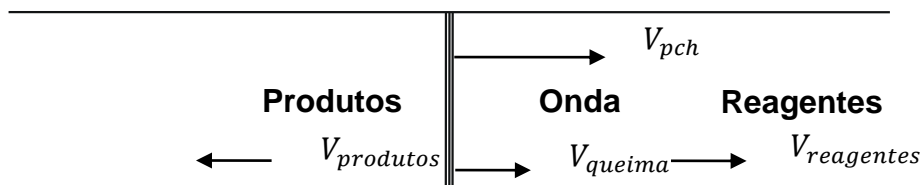


Figura 2.1 – Esquema representativo da velocidade de propagação de chama (adaptado de Machado, 2012).

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. 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. Um exemplo da utilização da representação da taxa de queima a partir da velocidade de propagação de chama encontra-se no programa comercial *BOOST* 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. 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 obtida 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* 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 Sodré & Yates (1998) e Aguiar & Sodré (2001), Barros (2003) adotou uma modelagem de combustão de duas zonas, intermediária entre a quase dimensional e a multidimensional. O objetivo foi levar em conta as características geométricas tridimensionais da câmara de combustão do motor, sem maiores impactos nos custos computacionais. Para tanto foi realizado um mapeamento prévio de diversas posições da frente de chama, assumida como esférica, e do pistão. O raio de chama é definido como a distância da frente de chama em relação ao ponto de ignição.

Foi adotado um modelo de onda (escoamento compressível) de combustão em contornos fechados. A velocidade de frente de chama é calculada pela equação de conservação de quantidade de movimento linear, controlada pela cinética química e pelo nível de turbulência do escoamento. A modelagem tridimensional da câmara de combustão fornece as informações dimensionais (áreas e volumes) da frente de chama e das zonas de gás queimado e não queimado necessárias ao modelo de combustão. A grande vantagem deste modelo é permitir avaliar qualquer tipo de câmara de combustão, por mais complexa que seja, além de avaliar a influência da posição da vela na propagação da frente de chama. Permite uma flexibilidade maior

em relação à condição operacional e tipo de motor ao embutir sua geometria. Permite uma previsão de início de detonação, a partir de cálculo mais preciso da temperatura dos gases não queimados, podendo-se utilizar o limite de autoignição para predição.

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.

Bollinger & Williams (1949) reportaram velocidades de chama turbulentas, em queimador sob condições de queima similares, para três combustíveis diferentes, acetileno, etileno e propano. Foi obtida uma correlação empírica comum, dada pela eq. (2.2).

$$S_T = 0,18 S_L d^{0,26} Re^{0,24}, \quad (2.2)$$

onde, d , é o diâmetro do queimador em cm e S_T é dado em cm/s. 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).

Sharma & Mohan (1984) apresentaram correlações empíricas devidas a Wohl et al. (1953) e Lefebvre & Reid (1966), respectivamente dadas pelas eqs. (2.3) e (2.4).

$$S_T = S_L \left[1 + 26,2 \frac{u'_{rms}}{U} + 1,4 \left(\frac{U}{24} \right)^{1,12} \right], \quad (2.3)$$

$$S_T = S_L [1 + 0,43 u'_{rms} + 0,04U], \quad (2.4)$$

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. (2.5).

$$S_T = S_L \sqrt{\frac{1 + \varepsilon}{D_M}}, \quad (2.5)$$

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

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 e cita como exemplo Andrews et al. (1975), que apresentaram 13 diferentes modelos. Mostra mais três exemplos de modelos, devidos a Damköhler (1947), eq. (2.6), Clavin & Williams (1982), eq. (2.7), e Klimov et al. (1983), eq. (2.8).

$$S_T = S_L \left(1 + \frac{u'_{rms}}{S_L} \right), \quad (2.6)$$

$$S_T = S_L \left\{ 0,5 \left[1 + \left(1 + 8C \frac{u'_{rms}}{S_L} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}^{1/2}, \quad (2.7)$$

$$S_T = 3,5 S_L \left(\frac{u'_{rms}}{S_L} \right)^{0,7} \quad (2.8)$$

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. O fator de turbulência, dada pela eq. (2.9),

$$F_T = \frac{S_T}{S_L} = [2,00 + 1,21(u'_{rms}/S_L)(P/P_m)^{0,82}]S [1,07(r_f/30)^{1,04}], \quad (2.9)$$

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.

Heywood (1988) faz referência a outra relação proposta no trabalho de Groff & Matekunas (1980), representada pela eq. (2.10), que não foi otimizada para o avanço de ignição, sendo, portanto mais geral.

$$F_T = [1,77 + 1,46(u'_{rms}/S_L)(P/P_m)^{0,75}] \quad (2.10)$$

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. (2.11).

$$F_T = [1,00 + 4,01(u'_{rms}/S_L)](r_f/0,03)^{0,5}, \quad (2.11)$$

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.

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. (2.12) e (2.13).

$$F_T = CRe_{ad}^{1,28}(D_p/D_0)^{-0,45}; Re_{ad} < 25000, \quad (2.12)$$

$$F_T = CRe_{ad}^{0,72}(D_p/D_0)^{-0,45}; Re_{ad} \geq 25000, \quad (2.13)$$

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 $D_0 = 0,0254\text{ m}$. Os motores *MIT* possuem projeto padrão, com câmara de combustão cilíndrica e vela central.

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. (2.14) 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.

$$\frac{V_{pch}}{S_T} = \frac{\rho_{ub}}{\rho_b}(1 - Y_b) + Y_b = \frac{\rho_{ub}/\rho_b}{[(\rho_{ub}/\rho_b) - 1]X_b + 1}, \quad (2.14)$$

Na eq. (2.14), ρ_{ub} e ρ_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 da razão de massas

específicas dos gases não queimados e queimados (ρ_{ub}/ρ_b). Segundo Heywood (1988) esta razão situa-se em torno de 4 nos motores de ignição por centelha.

Lipatnikov & Chomiak (2000) discute qualitativamente diversas expressões de velocidade de queima turbulenta (Yakhot, 1988; Cant et al., 1990; Peters, 1992; Mantel & Borghi, 1994; Schmidt et al., 1998, entre outros) utilizadas em soluções multidimensionais de motores de combustão com ignição por centelha. A análise indica que há lacunas importantes no desenvolvimento de modelos de propagação de chama, notadamente, a dependência desta com a pressão e o crescimento da chama.

Bjerkborn et al. (2012) apresentou um modelo de propagação de chama turbulenta, combinado com um modelo zero dimensional de duas zonas capaz de prever a detonação com precisão. O modelo de propagação de chama utilizado é devido à Kolla et al. (2009).

Liu et al. (2013) destaca que a propagação turbulenta da chama na câmara de combustão pode ser dividida em três etapas: inicial, que praticamente não apresenta correlação com as condições de operação do motor, intermediária, a qual pode ser prevista por modelos de chama turbulenta propostos por Abdel-Gayed et al. (1987), Bradley et al. (1992), Lipatnikov & Chomiak (2000a e 2002) e Zimont (1979) e uma etapa final que merece estudos mais aprofundados. Uma tentativa de modelar esta última etapa foi realizada por Aghdam (2003).

Machado (2012) propôs para as velocidades de propagação de chama turbulentas no interior do cilindro do motor um comportamento típico de lei de potência em relação às dependências com a pressão e temperatura, conforme a relação funcional expressa na eq. (2.15).

$$V_{pch} \propto \left(\frac{T_{ub}}{T_0}\right)^\alpha \left(\frac{P}{P_0}\right)^\beta \quad (2.15)$$

Este tipo de dependência pode ser caracterizado com variações no expoente de dependência com a pressão, inclusive do seu sinal, dependendo dos diferentes equipamentos utilizados nos experimentos e condições de combustão. Por sua vez, o expoente de dependência com a temperatura se mostrou mais estável para diferentes condições de queima, assumindo valores em torno de 2, e suportado por considerações teóricas (Turns, 2000; Sharma & Mohan, 1984).

Para caracterizar a influência da turbulência, Machado (2012) propôs uma dependência também em lei de potência com o Reynolds de admissão, conforme sugerido em Barros (2003), no seu trabalho de simulação de motor. No entanto, o Reynolds de admissão foi reduzido, dividindo-o pelo fator 2300, característico do regime de transição laminar-turbulento de escoamentos em dutos. A dependência com o diâmetro adimensional do pistão foi suprimida. Desta forma, a proposição para a relação de redução assumiu a forma da eq. (2.16).

$$V_{pch} = S_{L_0} Re_{ad_r}^{\xi} \left(\frac{T_{ub}}{T_0} \right)^{\alpha} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\beta}, \quad (2.16)$$

onde T_0 e P_0 são a temperatura e pressão na condição padrão (101,325kPa e 298K). S_{L_0} é a velocidade laminar de referência do combustível na condição padrão, para a razão de equivalência adotada, e Re_{ad_r} é o número de Reynolds de admissão reduzido. Os expoentes ξ , α e β foram determinados a partir de extensos dados experimentais, sendo assumidos valores típicos nas diferentes condições de carga parcial e plena do motor.

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.

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.

2.1.3.3 Velocidades de chama laminares

A combustão e suas respectivas chamas podem ser classificadas como pré-misturadas ou 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. 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. Este regime de combustão é típico na combustão de gotas em motores de ignição por compressão (ciclo Diesel).

De uma forma geral, a chama pode ser definida como uma zona localizada de combustão autossustentada que se propaga com velocidade subsônica, chamada de deflagração (Turns, 2000). O foco do presente trabalho reside no estudo de combustíveis para motores de ignição por centelha, de tal forma que serão abordadas as velocidades de chama pré-misturadas subsônicas (deflagração) laminares.

Conforme visto no item anterior, a modelagem da velocidade de propagação da chama passa pela determinação prévia da velocidade de chama laminar. Para o estudo das velocidades de chama laminares assume-se esta como sendo unidimensional e normal à região de reação, dada pela eq. (2.17).

$$S_L = \frac{\dot{m}_{ub}}{\rho_{ub}A}, \quad (2.17)$$

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, ρ_{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, 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, 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. Contêm informações de difusividade, reatividade e características exotérmicas de uma dada mistura (Davis et al., 1996).

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. 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.

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; Tanoue et al., 2015).

A velocidade de chama laminar pode ser modelada através dos mecanismos de reação química de diferentes combustíveis. No entanto, tais mecanismos dependem dos dados experimentais de velocidades de chama laminares para sua validação, o que mantém a dependência de resultados experimentais.

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

Metghalchi & Keck (1982) determinaram experimentalmente as velocidades de chama laminares para várias misturas ar-combustível, utilizando metanol, iso-octano e gasolina, em 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 a expressa pela eq. (2.18).

$$S_L = S_{L_0} \left(\frac{T_{ub}}{T_0} \right)^\alpha \left(\frac{P}{P_0} \right)^\beta (1 - 2,1 Y_{dil.}), \quad (2.18)$$

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, incluída na equação para considerar 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. (2.19), (2.20) e (2.21), 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.

$$S_{L_0} = B_M + B_2(\phi - \phi_M)^2 \quad (2.19)$$

$$\alpha = 2,18 - 0,8(\phi - 1) \quad (2.20)$$

$$\beta = -0,16 + 0,22(\phi - 1) \quad (2.21)$$

A eq. (2.19) para o cálculo da velocidade de chama laminar de referência apresenta os parâmetros B_M , B_2 e ϕ_M , que dependem do combustível, e são apresentados para alguns componentes puros. ϕ é a razão de equivalência da mistura, ϕ_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) utilizou dados experimentais de velocidades obtidos pelo autor e outros pesquisadores, juntamente com previsões baseadas em modelos teóricos de termoquímica com etanol, misturas de etanol e água, metanol, iso-octano, misturas de iso-octano e etanol e propano, propondo para a velocidade de chama uma expressão dependente da lei de potência com a temperatura e pressão, semelhante àquela apresentada por Metghalchi & Keck (1982), sendo expressa pela eq. (2.22).

$$S_L = S_{L_0} \left(\frac{T_{ub}}{T_0} \right)^\alpha \left(\frac{P}{P_0} \right)^\beta (1 - fF), \quad (2.22)$$

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. (2.23).

$$S_{L_0} = ZW\phi^n \exp[-\xi(\phi - 1,075)^2], \quad (2.23)$$

onde os valores dos parâmetros Z , W , n e ξ 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. (2.18) sem o termo referente ao diluente. Os expoentes foram obtidos por ajustes empíricos a dados de velocidades de chama laminares em câmara de volume constante, para diferentes combustíveis e razões de equivalência.

Heywood (1988) apresenta a eq. (2.18), também 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 que, para razões de equivalências estequiométrica (1,0) e rica (1,11), típicas da faixa de operação dos motores de ignição por centelha, os expoentes, α_g e β_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). 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, evidenciando a importância da correção do efeito de estiramento de chama na determinação das velocidades laminares de chama (Law, 1988).

Davis & Law (1998) determinaram experimentalmente as velocidades de chama laminares do iso-octano e n-heptano em misturas com o ar à temperatura ambiente e pressão atmosférica. O efeito de estiramento de chama foi corrigido tanto por extrapolação linear como não linear.

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 450K e pressão de 304kPa, cobrindo razões de equivalência de 0,55 a 1,4. Os principais resultados reportam a influência da estrutura molecular de diversos componentes na velocidade de chama laminar, tais como: 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 C₄ e superiores; 4 - Cicloalcanos (ciclopentano e ciclohexano) apresentaram velocidades comparáveis aos alcanos lineares; 5 - Os alcenos são mais rápidos que os correspondentes alcanos; 6 - Moléculas com elevado grau de insaturação (alcinos) apresentaram velocidades de chama superiores aos alcenos, alcanos e aromáticos estudados (exceção do etileno), entre outros.

Van Lipzig et al. (2011) realizou medições experimentais de velocidades de queima laminares adiabáticas para o n-heptano, iso-octano, etanol e misturas destes, utilizando um queimador planar com a metodologia do fluxo de calor (De Goey et al., 1993; Konnov et al., 2011). Os resultados das velocidades dos componentes puros foram comparados com resultados obtidos por outras técnicas (Gülder, 1982; Egothopoulos et al., 1992; Davis & Law, 1998; 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. Com relação aos resultados obtidos para as misturas binárias e terciárias dos componentes, estas apresentaram sempre valores de velocidades intermediários aos dos componentes puros. Os autores relatam a importância na obtenção de dados sistemáticos de velocidades de queima laminares de misturas de componentes para o desenvolvimento de regras de mistura empíricas e validação de modelos cinéticos.

Machado (2012) propôs uma metodologia de combinação em base molar das velocidades de chama laminares, na condição padrão, dos componentes puros utilizados nas formulações para determinar as velocidades de chama laminares de formulações reduzidas. Estas velocidades foram usadas nas correlações propostas para a modelagem da velocidade de propagação da chama no interior do cilindro de um motor comercial. A escolha da ponderação em base molar foi justificada pela dinâmica das reações químicas, que ocorrem em base molar. Assumiu-se, portanto, um comportamento linear para a combinação das velocidades dos componentes em mistura. As velocidades de chama laminares na condição padrão dos componentes puros utilizados foram obtidas de trabalhos anteriores para as razões de equivalência 1,0 para carga parcial e 1,11 para carga plena.

Broustail et al. (2013) apresentaram velocidades de chama laminares para misturas butanol/iso-octano e etanol/iso-octano, utilizando a metodologia de chama expansão esférica, em uma câmara de volume constante. Os resultados foram obtidos para concentrações de 0% , 25% , 50% , 75% e 100% (em volume) de butanol e etanol, com relações de equivalência entre 0,7 e 1,4, a diferentes pressões iniciais (0,1, 0,3 , 0,5 e 1,0 MPa) e uma temperatura inicial de 423K. A adição dos álcoois aumenta a velocidade de combustão laminar, assim como a elevação da pressão inicial. A partir de dados experimentais, uma correlação com a velocidade de queima laminar é sugerida como uma função da pressão inicial, da razão de equivalência e da concentração de butanol ou etanol.

Brusca et al. (2015) mostraram estudo da velocidade de queima laminar de combustíveis em função da razão de equivalência (0,8 a 1,3), bem como da pressão (1 a 10 bar) e da temperatura (323K a 473K). Um modelo matemático para interpolar e extrapolar dados experimentais foi proposto e validado, sendo encontrados erros relativos médios de cerca de 2% e erro máximo de 4% em relação aos dados experimentais.

Manaa et al. (2015) apresentaram o desenvolvimento e validação de uma formulação reduzida para gasolina, usando a velocidade da chama laminar como um alvo. Velocidades de queima laminar foram medidas usando uma câmara de volume constante com ignição central. Os combustíveis testados incluíram iso-octano, n-heptano, tolueno, misturas destes e três gasolinas com *RON* 70, 85 e 95. A temperatura inicial foi de 358K, as pressões de até 0,6 MPa e a razão de equivalência variou de 0,8 a 1,6. Velocidades de queima de laminar foram obtidas com misturas ternárias de componentes puros em diferentes condições experimentais e correlacionadas com sucesso às gasolinas com *RON* de 70, 85 e 95.

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.

2.2 Autonomia em veículos

A frota mundial passou de cinco milhões de veículos desde a Segunda Guerra Mundial para cerca de um bilhão atualmente e as previsões indicam que este número pode chegar a dois bilhões de antes de 2050. Praticamente todo o crescimento esperado para as emissões de gases de efeito estufa no setor dos transportes virá de carros de passeio e caminhões nas economias emergentes. Mesmo que os países desenvolvidos alcancem importantes melhorias na autonomia de suas frotas de veículos, por exemplo, através de eletrificação, isto não será suficiente para superar o impacto do grande número de veículos globalmente. Fica claro que um esforço global para combater as mudanças climáticas só pode ter sucesso, abordando também, como uma questão de prioridade, a autonomia dos veículos em economias emergentes (*GFEI, Global Fuel Economy Initiative, 2016*).

No setor de transportes, a autonomia de um determinado veículo ou frota é calculada como a razão entre a distância percorrida por unidade de volume de combustível consumido (por exemplo, milhas por galão ou quilômetros por litro). Inversamente, mas com o mesmo propósito, pode ser determinado o consumo de combustível (por exemplo, litros por cem quilômetros). Assim, quanto maior for a distância percorrida por quantidade de combustível, maior a eficiência. Em outras

palavras, quanto menor for a energia consumida para percorrer uma determinada distância, mais eficiente é o veículo e menores são as suas emissões de dióxido de carbono, CO₂.

É importante não confundir normas para emissões de gases de efeito estufa e autonomia de veículos com padrões de emissões para os poluentes convencionais, de efeito local (hidrocarbonetos - HC, monóxido de carbono - CO, óxidos de nitrogênio - NO_x, entre outros). O termo "normas de emissões dos veículos" geralmente se refere a programas bem estabelecidos que abordam poluentes convencionais. Normas de autonomia e emissões de CO₂ são usualmente geridas por legislação específica.

2.2.1 Ciclos de ensaio

As medições dos poluentes convencionais, de CO₂ e de autonomia, geralmente, são realizadas em um mesmo ciclo de ensaio, que é comum a todos os veículos testados em um determinado país ou região. A autonomia pode ser medida diretamente, em base mássica ou volumétrica a partir do tanque de combustível, ou por balanço de carbono, utilizando os resultados de análise dos gases de escape (incluindo o CO₂).

Nevius et al. (2008) realizaram estudo comparativo entre as medições volumétrica e por balanço de carbono da autonomia em ensaios realizados em dinamômetro de chassi. Foi encontrada boa correlação entre as medições realizadas pelos dois métodos. No entanto, existem diferenças significativas entre as medições durante o período de partida a frio. Isto é uma preocupação porque grande fração das emissões do motor do ciclo Otto é gerada somente durante a partida a frio.

Melo & Carvalho (2008) apresentaram método simplificado de cálculo da incerteza da autonomia em veículos medida pelo método do balanço de carbono. Cálculos complexos foram evitados, especialmente aqueles que envolvem as derivadas parciais. Portanto, o método proposto pode ser aplicado a qualquer laboratório equipado com qualquer tipo de software comercial.

Em relação aos ciclos de ensaio, os procedimentos oriundos da Europa e dos Estados Unidos são os mais comumente utilizados para medir a autonomia. A Tabela 2.1 apresenta os ciclos de ensaio adotados em alguns países do mundo.

Tabela 2.1 – Ciclos de ensaio adotados em alguns países do mundo.

Região de Origem	Adotado por
Europa	Austrália, Chile, China, Taipei, Cingapura, Vietnam, Áustria, Alemanha, Holanda, Reino Unido e Tailândia
Estados Unidos	Estados Unidos, Canadá, Coreia do Sul Brasil, Taipei
Japão	Japão, Hong Kong e China

O ciclo de ensaio *FTP-75* (*Federal Test Procedure n.75*) tem sido utilizado para a certificação de emissões e autonomia de veículos leves nos Estados Unidos. O teste é muitas vezes referido como simplesmente "*FTP*" (não deve ser confundido com o teste de *FTP* para motores pesados). O ciclo *FTP-75* é composto pelos seguintes segmentos: 1 – Partida a frio e transiente (temperatura ambiente de 20 a 30 ° C), 0-505s; 2 – Estabilizada, 506-1372s; 3 – Intervalo (min. 540s, máx. 660s) e 4 – Partida a quente e transiente, 0-505s.

Os valores de autonomia são calculados com base em testes *FTP* (autonomia urbana) e *HWFET* (highway fuel economy test – autonomia em estrada). Desde 2008, nos Estados Unidos, é adotado o método de cinco ciclos, cujo resultado final é apresentado na etiqueta de eficiência energética do veículo (etiqueta *EPA – Environmental Protection Agency*). Os resultados finais de autonomia são calculados com dois testes complementares para simular condições agressivas de direção (*US06*) e o uso do ar condicionado (*SC03*), um *FTP* a temperatura ambiente (20° a 30°C) e um *FTP* a baixa temperatura (-6,7 °C), bem como o ciclo *HWFET*. A Figura 2.2 apresenta o ciclo *FTP-75*.

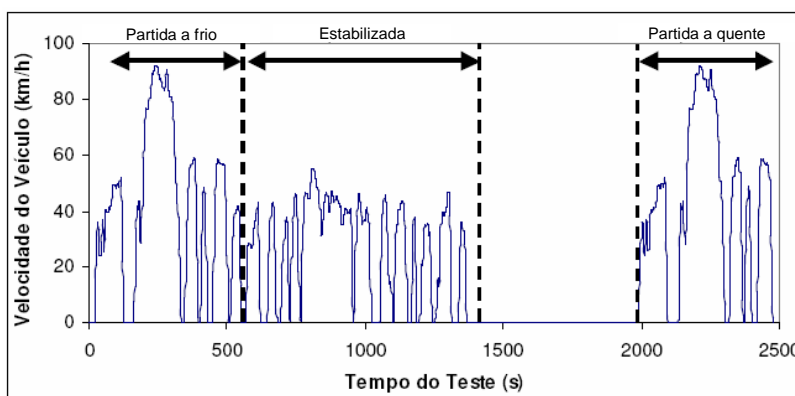


Figura 2.2 – Perfil de velocidades do ciclo FTP-75.

O ciclo europeu completo inclui quatro segmentos urbanos *ECE-15* (*United Nations Economic Commission for Europe*) repetidos, sem interrupção, seguido por um segmento *EUDC* (*Extra Urban Driving Cycle*). Antes do ensaio, o veículo permanece em repouso, durante pelo menos 6 horas a uma temperatura de ensaio de 20 a 30 ° C. Em seguida, é dada a partida e o veículo permanece em marcha lenta por 40 segundos. Após esse período, as emissões começam a ser coletadas. A partir de 2000, o período de marcha lenta foi eliminado e a medição passou a incluir a partida a frio, isto é, atualmente, a coleta das emissões se inicia simultaneamente à partida do veículo. Com este novo procedimento de partida a frio modificado, o ciclo passou a ser conhecido como o novo ciclo europeu de condução (*NEDC*). A Figura 2.3 apresenta o perfil de velocidades do ciclo *NEDC*.

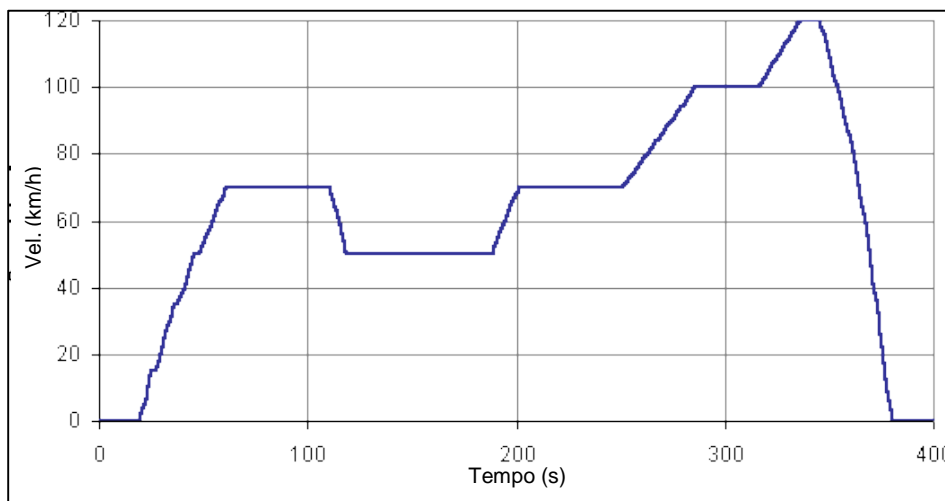


Figura 2.3 – Perfil de velocidades do ciclo NEDC.

A regulamentação japonesa introduziu, a partir de 2005, um novo ciclo de ensaio para medição de emissões de poluentes e autonomia em veículos leves, o *JC08*. O teste representa a condução em trânsito urbano congestionado, incluindo períodos em marcha lenta e frequentemente alternando aceleração e desaceleração. A medição é feita duas vezes, uma com partida a frio e outra com partida a quente. O perfil de velocidades do ciclo *JC08* é esquematicamente mostrado na Figura 2.4.

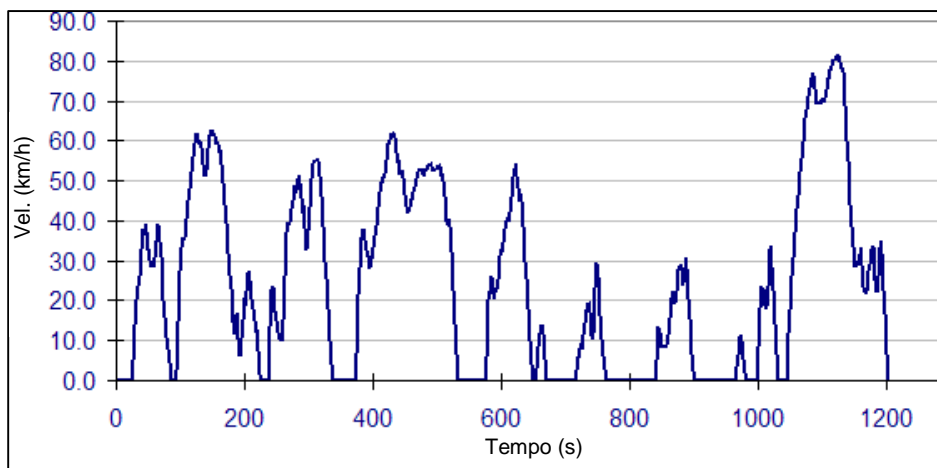


Figura 2.4 – Perfil de velocidades do ciclo JC08.

Carvalho et al. (2012) apresentam uma visão geral dos principais ciclos de condução adotados no mundo avaliando as suas características, as principais tecnologias veiculares disponíveis em cada mercado e as propostas de correlação entre o ciclo norte-americano, também adotado no Brasil e o procedimento europeu.

Tsokolis et al. (2015) desenvolveram uma modelagem para simular o efeito do ciclo *WLTP* (*Worldwide harmonized Light-duty Test Procedure*) sobre as emissões de CO₂ e a autonomia de veículos leves. O ciclo *WLTP* é uma tentativa de unificar os ciclos de condução utilizados mundialmente. Foram desenvolvidos modelos de veículos utilizando software de simulação da *AVL*. Cada modelo de veículo foi validado comparando simulações com as medições, tanto para o ciclo *WLTP* quanto para o ciclo *NEDC*, alcançando erros menores do que 2,5% ou 2g de CO₂/km sobre os valores experimentais.

2.2.2 Fatores que afetam a autonomia em veículos

Há uma série de aspectos que afetam a autonomia dos veículos. A eficiência do motor varia de acordo com a tecnologia utilizada como, por exemplo, ciclos Diesel e Otto, a massa do veículo e sua carga, a qualidade e o tipo de combustível, o comportamento do condutor, as condições de tráfego, o arrasto aerodinâmico, o atrito de rolamento dos pneus, a frenagem regenerativa, utilizada em veículos híbridos, o tipo de transmissão, o funcionamento do ar condicionado, o arrefecimento do motor, os sistemas elétricos, incluindo faróis, o carregamento da bateria, suspensão ativa, ventiladores de circulação, sistemas de mídia, alto-falantes

e demais eletrônicos, entre outros. A seguir serão apresentados alguns estudos disponíveis na literatura sobre os diversos fatores que afetam a autonomia dos veículos, com maior foco na influência dos combustíveis neste parâmetro, dado o objetivo do presente trabalho.

Hochhauser et al. (1993) analisaram medidas de autonomia de veículos participantes da fase I do Programa Norte Americano de Melhoria da Qualidade do Ar (*Auto/Oil-AQIRP*). As seguintes características dos combustíveis foram examinadas: teor de aromáticos, teor de olefinas, $T90$, PVR (pressão de vapor Reid) e a presença de compostos oxigenados (MTBE, ETBE e etanol). Duas frotas de veículos foram testadas: vinte veículos do ano 1989 e catorze veículos dos anos 1983 a 1985. As medidas de autonomia foram baseadas no método do balanço de carbono. As seguintes variações nas propriedades dos combustíveis resultaram em reduções de autonomia em ambas as frotas: redução de aromáticos e olefinas, redução do $T90$ e adição de compostos oxigenados. Mudanças na PVR não tiveram um efeito significativo sobre a autonomia. Alterações na autonomia foram altamente correlacionadas tanto com o poder calorífico do combustível como com uma combinação de massa específica do combustível e o teor de oxigênio. A análise de sensibilidade do sistema veículo/combustível às mudanças no poder calorífico do combustível mostraram que os valores do fator R devem estar no intervalo de 0,93 a 0,94, e não a 0,6 utilizado até então pela *EPA* para calcular a autonomia. O fator R é definido de acordo com a eq. (2.24).

$$R = \frac{\left(\frac{A_i}{A_r}\right) - 1}{\left(\frac{PCI_i}{PCI_r}\right) - 1}, \quad (2.24)$$

onde A_i é a autonomia resultante de um ensaio utilizando um combustível de teste com poder calorífico inferior PCI_i . A_r é a autonomia resultante de um ensaio com um combustível de referência com poder calorífico PCI_r . A *EPA* usa o fator R para estabelecer uma ligação entre os resultados de testes com combustíveis modernos de certificação e resultados de testes equivalentes efetuados em 1975 com indolina, composto orgânico aromático heterocíclico com estrutura consistindo de um anel benzênico de seis membros, fundido a um anel contendo nitrogênio de cinco membros.

Sluder et al. (2014) reavaliaram o fator R , considerando que a gasolina americana passou a conter quantidades significativas de etanol. Foram analisados dados experimentais de três estudos anteriores (*Federal Register 51*, 1986; *Title 40 Code of Federal Regulation*, 2012; Hochhauser et al., 1993) sendo observada tendência de aumento do valor de R para os combustíveis E15 e E20 (gasolinas contendo 15% e 20%v/v de etanol) no ciclo de ensaio *LA92 (California Unified Cycle)*. O aumento do teor de etanol não teve um efeito significativo sobre os valores do fator R para o ciclo *FTP*.

Beck et al. (2006) apresentaram correlações bem sucedidas entre a octanagem da gasolina e a autonomia do veículo, medida em dinamômetro de chassis. Foram utilizados veículos equipados com motores de injeção direta e indireta (*port fuel*). A autonomia foi medida ao longo de um ciclo de ensaio fixo para uma matriz de dez combustíveis. Foram observadas variações estatisticamente significativas na autonomia dos veículos com os diferentes níveis de octanagem testados.

Na mesma linha, Seo et al. (2009) pesquisou os efeitos das propriedades gasolina sobre as emissões de CO_2 , bem como sobre a autonomia em veículos a gasolina modernos, concluindo que o aumento da octanagem melhora a autonomia e que as emissões de CO_2 dependem da composição de carbono na gasolina.

Orlebar et al. (2014) também investigaram os efeitos da octanagem sobre o desempenho, isto é, aceleração, potência e autonomia de um modelo recente de veículo norte americano, equipado com um motor de baixa cilindrada, porém com turbo e injeção direta de gasolina. O estudo conclui que em cargas parciais, típicas dos ciclos padronizados de condução, não se pode afirmar que a octanagem leve a benefícios de autonomia.

Leone et al. (2014) realizaram testes em dinamômetro comparando combustíveis de diferentes octanagens e teores de etanol, em um motor *Ford 3.5L* turbo de injeção direta utilizando três taxas de compressão. Foram testadas misturas com uma mesma gasolina base contendo 10%, 20% e 30% de etanol anidro, resultando em octanagens crescentes, bem como, misturas com estes mesmos teores, porém com gasolinas diferentes, de forma que a octanagem resultante fosse a mesma. Os resultados em motor foram usados na simulação de um veículo, que mostrou ganho de 1% na autonomia do combustível E20-96RON com razão de compressão 11,9:1 em relação ao combustível E10-91RON com razão de compressão 10:1. Com a mesma base de comparação, o combustível E30-101RON

com razão de compressão 13:1 resultou em variações de 2% pior a 1% melhor, dependendo do ciclo de condução. Aqueles combustíveis com octanagem fixa e teor de etanol crescente não resultaram em oportunidades de melhoria da eficiência, devido à redução do poder calorífico com o aumento do teor de etanol.

Farrell et al. (2003) sugerem que gasolinas contendo maior teor de aromáticos e olefinas, bem como menor teor de etanol resultam em melhores valores de autonomia. Os ensaios foram realizados com um veículo equipado com um motor de dois litros e injeção direta de combustível e sete combustíveis com diferentes teores de aromáticos, olefinas e etanol.

Simmons et al. (2015) apresentam uma relação entre a aplicação de novas tecnologias veiculares e a autonomia dos veículos. O estudo conclui que entre 2011 e 2014 o cumprimento das normas do *CAFE (Corporate Average Fuel Economy)* resultou em um aumento de cerca de 10% na autonomia dos veículos. Veículos equipados com tecnologias específicas para a melhoria da autonomia são responsáveis por aproximadamente 45% das vendas totais em 2014 nos Estados Unidos. Os fatores chave ligados a melhoria de autonomia incluem reduções de massa, atrito mecânico e arraste aerodinâmico, avanços na eficiência de combustão, redução da capacidade volumétrica do motor (*downsizing*), *upgrades* de transmissão e o crescimento da frota de veículos híbridos. Ganhos entre 5 e 15% podem ser atingidos pela adoção de transmissões com maior número de velocidades e de tecnologias avançadas de combustão interna, incluindo abertura de válvulas variável, injeção direta de gasolina e turboalimentação com *downsizing*. Melhorias entre 20% e 70% podem ser obtidas com a aplicação de motores diesel e híbridos.

Yanni & Venhovens (2010) desenvolveram um modelo simplificado para estudar a influência da variação da massa do veículo, da sua aerodinâmica e do atrito dos pneus na autonomia medida em diversos ciclos de condução. Os resultados indicaram que a massa do veículo representa o fator mais importante dentre os estudados. Uma redução de 10% na massa do veículo representou ganho médio de 6,7% na autonomia. A redução de 10% no arraste aerodinâmico se mostrou mais importante em velocidades mais elevadas, resultando em ganho médio de 2,7% na autonomia. Já a redução em 10% do coeficiente de atrito dos pneus resultou em ganho médio de 2,3%. Os resultados do modelo simplificado foram comparados com sucesso a valores calculados por modelos mais complexos disponíveis em programas comerciais de simulação.

Thomas et al. (2014) realizaram estudo do impacto da pressão dos pneus, janelas abertas e transporte de carga em veículos na autonomia. A partir ensaios de desaceleração livre em pista com os veículos submetidos às condições acima, os coeficientes do dinamômetro de chassi foram obtidos, permitindo a execução de experimentos em laboratório seguindo ciclos de condução padronizados. Os casos de pressão baixa dos pneus resultaram em desde perdas negligenciáveis até 10% na autonomia, dependendo do caso específico e do ponto de teste. A condução com todas as quatro janelas abertas resultou em pioras entre 4% e 8,5% para um sedan compacto e entre 1 a 4% para um utilitário esportivo. A redução de autonomia relativa ao caso de carga montada na cobertura de um sedan compacto ficou entre 25% e 27% em velocidades maiores, onde o arrasto aerodinâmico é mais pronunciado.

Schwaderlapp et al. (2014) avaliaram formas de redução de atrito mecânico de um conjunto propulsor (motor+transmissão). A aplicação de rolamentos com diâmetros otimizados oferecem um potencial de redução de atrito de até 40%. Para reduções de fricção no conjunto dos pistões, revestimentos da camisa do cilindro e otimizações nos anéis dos pistões mostram um potencial elevado, de até 44%. Os jatos de óleo para refrigeração dos pistões podem ser otimizados, diminuindo as perdas da bomba de óleo e fornecendo até 65% de redução. A tendência em tecnologia de transmissões com embreagens mais eficientes e menor viscosidade do óleo têm potencial de redução de atrito até 30%. Todas estas medidas resultam em um potencial total de redução de atrito de 28%, chegando em um potencial de redução de CO₂ no ciclo *NEDC* de cerca de 8,5%.

Carvalho et al. (2009), Bishop et al. (2007), Akehurst et al. (2004), Leone et al. (2001) comentam em seus trabalhos as contribuições de outras tecnologias veiculares no que se refere à melhoria da autonomia. São citados a adoção de sistemas *start/stop*, em que o motor de combustão interna é desligado quando o veículo está parado e um motor elétrico o substitui na partida do veículo, a introdução de transmissões *CVT* (*Continuously Variable Transmission*), a desativação de cilindros em determinadas situações de operação do veículo, uso de atuadores eletrônicos para acionamento das válvulas de admissão e de escape e modos de combustão avançados, como o *CAI* (*Controlled Auto-ignition*) para veículos a gasolina.

2.2.3 Simulação da autonomia de veículos

Lyu & Rogers (2006) utilizaram o software *V-Sim*, desenvolvido pela Ricardo Inc., para simular a autonomia de um veículo. O programa contém modelos detalhados de todos os subsistemas: motores, transmissões, sistemas elétricos, plataformas, controladores e emissões, permitindo a construção de modelos preditivos de autonomia, emissões e desempenho em ciclos padrão ou condições reais. A simulação foi validada satisfatoriamente por resultados experimentais. Foram, então, propostas treze diferentes configurações de calibração de motor e transmissão, sendo obtidas as respectivas autonomies. Os autores destacam o ganho de tempo e flexibilidade com o uso de modelos para o projeto de veículos.

Kwon et al. (2007) aplicou a ferramenta *PSAT (Powertrain System Analysis Toolkit)* com o objetivo de reduzir a incerteza da modelagem da autonomia realizada pelo simulador *MOVES (Multi-scale Motor Vehicle Emission Simulator)*, utilizado pela *EPA*. Resultados considerados satisfatórios pelos autores apontaram previsões com erros de até 5% para um veículo convencional, considerando diferentes ciclos de condução.

Srinivasan & Kothalikar (2009) utilizaram o programa *AVL Cruise* para modelar um veículo real. A confiabilidade e a precisão da simulação foram extensivamente investigadas, provando ser capaz de proporcionar previsões confiáveis de desempenho e autonomia, com diferenças menores do que 5% em relação aos experimentos. Os autores ressaltam que as técnicas de simulação representam instrumentos poderosos e eficazes para a identificação das modificações necessárias no projeto de motores e veículos para alcançar os requisitos cada vez mais restritivos.

Oh et al. (2014) realizaram modelagem dinâmica de veículos a gasolina e diesel, utilizando programa comercial da *AVL*. Dez veículos de passageiros foram testados em sete modos de condução. Os dados dos veículos (especificações, mapa de consumo de combustível, dados de troca de marchas, etc.) foram recolhidos e implementados como dados de entrada. Os cálculos foram realizados com a mudança dos modos de condução e tipos de veículos. A precisão da previsão dos resultados foi validada com base em dados de teste em dinamômetro de chassi, com a maioria dos dados apresentando variações de até 5% em relação ao experimento.

Thomas et al. (2013) analisaram os resultados dos testes de dinamômetro para 74 veículos em velocidades constantes de 50 a 80 mph. Usando esses dados experimentais, vários modelos simplificados foram desenvolvidos para prever a autonomia individual de veículos e suas variações ao longo do intervalo de velocidade 50-80 mph. Um método simples de média de resultados dos dados, que não requer o conhecimento de nenhum atributo do veículo, referido como a Estimativa Naïve, foi determinado e utilizado como ponto de partida.

O Modelo 1 usa apenas os dados de autonomia contidos na etiqueta *EPA*, amplamente disponíveis. A proposta é que este valor seja o indicativo do comportamento para o cruzeiro em estrada a velocidade constante. Da teoria, é sabido que o valor da autonomia constante da etiqueta é diretamente influenciado pela eficiência do conjunto propulsor, da massa do veículo, resistência ao rolamento e arrasto aerodinâmico. No entanto, o atributo atraente dessa abordagem é a simplicidade, pois apenas um parâmetro é necessário para estimar a autonomia à velocidade constante de um veículo. Inicialmente, o conjunto de dados para cada veículo, em termos de autonomia em função da velocidade, é assumido como sendo linear e uma linha de ajuste é criada pelo método dos mínimos quadrados, conforme eq. (2.25).

$$MPG = a + b \times V, \quad (2.25)$$

onde a é o coeficiente linear, b é o coeficiente angular do modelo de regressão, V é a velocidade e MPG (milhas por galão) é a autonomia.

Os resultados demonstraram uma alta qualidade de ajuste, medida pelo coeficiente R^2 , indicando que uma relação linear entre V e MPG é uma aproximação razoável. Por sua vez, a e b foram ajustados em relação ao valor de autonomia em estrada da etiqueta *EPA*, resultando em funções do segundo grau, conforme eq. (2.26).

$$MPG = (0,0533 \times EPA^2 - 0,3580 \times EPA + 30,0424) + (-0,0062 \times EPA^2 + 0,01345 \times EPA - 0,34192) \times V \quad (2.26)$$

Outros métodos foram explorados para melhorar o Modelo 1. Outras características foram consideradas, incluindo classe do veículo, número de cilindros

do motor, tipo de transmissão e os coeficientes da curva de carga em dinamômetro (A , B e C). As variáveis de alta correlação com a autonomia, identificadas por análise de regressão, foram os coeficientes A e C , resultando na eq. (2.27) para o Modelo 2.

$$MPG = (-10,833 + 2,669 \times EPA - 0,318 \times A + 544 \times C) + (0,235 - 0,0239 \times EPA + 0,00305 \times A - 7,7172 \times C) \times V \quad (2.27)$$

Um exame dos erros médios quadráticos entre o Modelo 2 e os resultados experimentais indica uma melhoria significativa sobre o Modelo 1.

Os Modelos 1 e 2 dependem de uma estimativa inicial para os coeficientes linear e angular, para em seguida se determinar tais coeficientes em função da variável EPA . Em vez de tal abordagem em duas etapas, no Modelo 3 as variáveis são associadas diretamente com os resultados de autonomia em cada velocidade (50 a 80 mph). Ou seja, MPG é estimada individualmente por regressão linear para cada velocidade. Apesar das variáveis utilizadas serem as mesmas em todos os 4 sub-modelos (50, 60, 70 e 80 mph), os seus coeficientes (parâmetros estimados a partir da equação de regressão linear) são diferentes. A forma geral do Modelo 3 é apresentada na eq. (2.28).

$$MPG = r_1 + r_2 \times A_i + r_3 \times B_i + r_4 \times C_i + r_5 \times EPA, \quad (2.28)$$

onde r_i são os coeficientes estimados por regressão linear. Os erros médios quadráticos em relação aos dados experimentais resultaram em valores menores do que os observados para os modelos 1 e 2.

O Modelo 4 foi formulado usando uma abordagem de engenharia / física, ao tentar capturar a relação entre potência do veículo e a autonomia. A potência de um veículo é estimada como a força de carga (F) multiplicada pela velocidade, com a força de resistência ao avanço estimada utilizando coeficientes de dinamômetro do veículo. Esta relação é expressa pela eq. (2.29).

$$P = FV = (A + BV + CV^2)V \quad (2.29)$$

A correlação encontrada entre os valores de autonomia a velocidade constante segue a seguinte expressão, mostrada pela eq. (2.30).

$$\text{Fuel Consump.} \left(\frac{g}{100mi} \right) = 6,1366e^{-0,03101EPA} + 0,1402 \times \left(\frac{FV}{1000} \right) \quad (2.30)$$

Os resultados do Modelo 4 são semelhantes aos do Modelo 3, mostrando previsões mais próximas dos dados experimentais do que os modelos 1 e 2. A comparação estatística indica ligeira vantagem do Modelo 4 em relação ao Modelo 3 em termos de percentagem de variação, em *MPG*, comparativamente ao experimento, mas o Modelo 3 é o melhor em prever *MPG* em função da velocidade.

Como forma de comparar o desempenho dos modelos, foram quantificados os percentuais de casos em que estes se enquadram em três patamares de diferenças percentuais em relação aos dados experimentais (2%, 3% e 4%). Com relação aos modelos 3 e 4, 73% dos casos apresentaram diferenças de até 2% em relação aos experimentos, 90% resultaram em até 3% de diferença e 95% se enquadraram em até 4% de diferença em relação aos dados experimentais.

2.3 Desempenho em veículos

Existem diversos trabalhos publicados sobre o desempenho de veículos. Muitos fatores podem influenciar o seu comportamento: massa, aerodinâmica, projeto do motor e tipo de combustível, entre outros. O foco do presente trabalho reside sobre a influência dos combustíveis, notadamente gasolina e etanol, sobre o desempenho dos veículos equipados com motor de ignição por centelha.

A importância do combustível para o melhor desempenho de veículos e redução de suas emissões é amplamente reconhecida. A gasolina tem sido utilizada como um combustível para motores há mais de cem anos. Inicialmente, apenas as características de destilação e a octanagem eram importantes para controlar a partida a frio, dirigibilidade e desempenho dos veículos. Com o advento dos programas de controle de emissões, a importância de outras propriedades veio à tona: o chumbo foi removido, foram adotados aditivos detergentes e componentes oxigenados, a volatilidade foi controlada, através da *PVR* (pressão de vapor Reid), para reduzir as emissões evaporativas, as propriedades de destilação foram ainda mais reconhecidas como chave para melhorar a dirigibilidade e o teor de enxofre foi reduzido, pois envenena os catalisadores (Colucci, 1998).

A maior parte dos trabalhos que versam sobre a influência do combustível no desempenho se refere a testes ou modelagens de motores. Por isso, a seguir são discutidos trabalhos realizados tanto em motores como em veículos.

2.3.1 Fatores que afetam o desempenho

Machado (2012) utilizou formulações reduzidas de combustíveis contendo n-heptano, iso-octano e tolueno associadas à técnica de Planejamento e Análise de Misturas. Mostrou que estas formulações, todas contendo 25% em volume de etanol anidro, foram adequadas para investigar componentes de combustíveis, identificando e correlacionando suas influências nos parâmetros de desempenho em motor. Ficou evidenciado o potencial da metodologia para auxiliar na formulação de combustíveis.

Pelas conclusões relacionadas pelo autor, o n-heptano pode ser um componente interessante para formulações destinadas a aplicações especiais, onde o fenômeno da detonação não seja susceptível, na medida em que ele contribui para uma redução do consumo, melhoria na eficiência de combustão e aumento de eficiência global. Por sua vez, para aplicações onde haja requisito de octanagem mínima elevada, tolueno e iso-octano são componentes importantes para aumentar o desempenho. A utilização do iso-octano pode ser mais vantajosa que a utilização do tolueno pela maior eficiência de combustão. Por outro lado, foi o tolueno que apresentou tendência de contribuir mais significativamente para aumentar a eficiência térmica. De forma geral, pode-se concluir que o iso-octano foi o componente mais versátil entre os testados, pois promove efeitos desejáveis e bom compromisso em todas as condições operacionais.

É importante salientar que as tendências e conclusões verificadas poderiam ser extrapoladas de forma qualitativa para outros componentes das mesmas famílias de hidrocarbonetos (n-parafinas, iso-parafinas e aromáticos), auxiliando na seleção de componentes e correntes de processos para formulação de combustíveis. Esta seleção prévia de componentes e correntes de processos pode ajudar na redução do número de testes experimentais necessários, contribuindo para redução de custos e prazos de desenvolvimento de combustíveis para diferentes aplicações.

Machado et al. (2014) apresentaram o efeito de diferentes formulações de combustíveis nos parâmetros de calibração, de combustão e de desempenho dos

motores de ignição por centelha, discutindo as potenciais vantagens do uso de maiores teores de iso-parafinas, n-parafinas ou aromáticos com relação ao desempenho do motor. As iso-parafinas e os aromáticos foram citados como importantes componentes na formulação da gasolina para aplicações de motor que exigem um combustível alta octanagem. As iso-parafinas têm a vantagem de apresentar uma estrutura molecular simples, maior relação ar-combustível estequiométrica e menor fração de carbono do que os aromáticos. Isso favorece, segundo os autores, um melhor compromisso entre ganhos de eficiência de combustão e redução de emissões.

Farrell et al. (2003) investigaram os efeitos da composição e propriedades do combustível sobre a eficiência de um veículo e um motor de injeção direta de gasolina. As gasolinas possuíam a mesma octanagem *RON* com diferentes níveis de aromáticos, olefinas, etanol e volatilidade. As principais conclusões foram as seguintes: o aumento de eficiência térmica foi correlacionado com aumento das olefinas e redução dos compostos aromáticos; maiores teores de olefinas resultaram em maiores velocidades de queima e maiores picos de torque em plena carga, devido a maiores avanços de ignição; níveis mais elevados de aromáticos levaram à diminuição da eficiência global.

Uma maior octanagem possibilita melhores aceleração e potência ao veículo. Com o valor desta propriedade mais elevado, o combustível, em mistura com o ar, pode suportar maior compressão antes da ocorrência da detonação. A origem da detonação pode ser explicada pela teoria de autoignição, embora as características e mecanismos do fenômeno ainda não sejam totalmente compreendidos. A teoria de autoignição sugere que, em regiões distantes da vela de ignição, a temperatura do gás não queimado é elevada por transferência de calor a partir da frente de chama, e mais significativamente, como consequência da compressão do processo de combustão. Se a ignição espontânea do gás não queimado ocorre, um aumento de pressão súbito é produzido, o qual se for suficientemente severo irá levar ao som característico de “batida de pinos”, podendo também causar danos mecânicos ao motor em casos extremos (Hudson et al., 2001). Taxas de compressão mais elevadas do motor se correlacionam diretamente com a sua potência e eficiência termodinâmica. Então, motores que são projetados para octanagens mais elevadas, normalmente, desenvolvem potência superior, extraindo maior parcela do poder calorífico do combustível.

McNally et al. (1991) apresentaram estudo realizado com base em dados levantados pelo *CRC (Coordinating Research Council)* em 182 veículos, sendo 78 deles equipados com sensor de detonação e 104 sem o referido sensor. O objetivo foi avaliar os efeitos potenciais da octanagem da gasolina sobre o desempenho dos veículos em aceleração. Os resultados mostraram que veículos equipados com sensor de detonação tiveram o desempenho significativamente comprometido pela octanagem da gasolina. Tais efeitos foram mais pronunciados nos ensaios a plena carga com níveis de octanagem abaixo do recomendado para o veículo. No entanto, alguns destes veículos mostraram melhor desempenho utilizando combustíveis com octanagem acima da recomendada. O desempenho em aceleração com veículos sem sensores de detonação não foi afetado pela octanagem da gasolina.

Sugawara et al. (1997) pesquisaram os efeitos de propriedades da gasolina, como as octanagens *RON* e *MON* e também tipos de componentes em relação ao desempenho em aceleração. Foram utilizados quatro veículos premium japoneses equipados com sensores para evitar a ocorrência de detonação. Foram utilizadas duas séries de combustíveis: misturas iso-octano–n-heptano para investigar o efeito da octanagem, com *RON* variando entre 80 e 100 e misturas 50% gasolina comercial-50% componentes puros, com *RON* aproximadamente constante e igual a 90, para avaliar os efeitos dos componentes. Com as misturas iso-octano–n-heptano, o desempenho em aceleração de todos os veículos foi melhorado conforme a octanagem aumentou. No entanto, o efeito foi diferente entre os veículos, devido aos algoritmos diversos nas respectivas centrais eletrônicas de comando. Para as misturas com gasolina comercial, o desempenho em aceleração de alguns veículos melhorou quando foram utilizados combustíveis com *MON* mais elevados e contendo MTBE, TAME ou cicloparafinas. O valor de octanagem calculado pela média ponderada de *RON* e *MON* foi um bom índice para expressar o desempenho antidetonante de um combustível, em vez de *RON* ou *MON*, em alguns veículos. Componentes com menores pressões de vapor (mais pesados) deterioraram o desempenho em aceleração devido à sua má vaporização.

Whelan et al. (1998) desenvolveram um método para determinação da octanagem recomendada para o veículo com base no seu desempenho em aceleração. Devido às medidas de adaptação tomadas pela central de comando (atraso da ignição), a capacidade de aceleração de um veículo equipado com sensor de detonação pode ser afetada pela octanagem do combustível. Para a maioria dos

veículos testados, o tempo de aceleração aumentou à medida que a octanagem do combustível diminuiu. O método foi utilizado para demonstrar o efeito de octanagem na aceleração de diversos veículos, todos equipados com sensor de detonação. No entanto, os autores ressaltam que é necessário desenvolver um algoritmo robusto que possa ser aplicado e que o procedimento deve ser modificado para incluir um pré-condicionamento mais extenso para minimizar efeitos de aprendizagem adaptativa.

Kalghatgi (2001) avaliou vinte e três veículos europeus e japoneses, equipados com sensores de detonação, quanto à aceleração e potência com diferentes combustíveis. A qualidade antidetonante do combustível é colocada como ponto central dos resultados, sendo descrita pelo seu índice de octanagem, $IO = RON - KS$, onde S é a sensibilidade ($RON - MON$) e K é uma constante para um dado automóvel e condições de operação. Quando IO aumenta, o desempenho nestes carros melhora até um limite, que é a octanagem requerida do veículo. Nos carros testados, K foi geralmente negativo, ou seja, para um dado RON um combustível de maior sensibilidade (MON inferior) resultou em melhor desempenho (limitado pela detonação). A octanagem requerida depende da estratégia empregada pelo fabricante do motor, a qual pode não corresponder ao melhor desempenho em aceleração ou à maior potência que o motor poderia desenvolver. O autor coloca outras implicações importantes: o comportamento de carros modernos parece diferir de tecnologias anteriores e deve ser estudado; as medidas convencionais de qualidade antidetonante, tais como $(RON + MON)/2$ não são adequadas para tais motores com valores negativos de K ; há espaço para calibração mais agressiva de motores por fabricantes para se obter o máximo proveito dos combustíveis disponíveis.

Akihama et al. (2004) avaliaram os efeitos da octanagem do combustível em um motor com injeção direta de gasolina e razão de compressão elevada. Na condição de plena carga, uma formulação reduzida com alto valor de RON e elevado teor de aromáticos apresentou benefícios significativos de torque/eficiência, em comparação com o iso-octano puro. Experimentos realizados com uma gasolina premium mostraram que o benefício desta combinação RON e aromáticos elevados também se aplica a combustíveis comerciais. Os aumentos de torque e eficiência chegaram a 13% e 21%, respectivamente, quando a razão de compressão foi elevada de 9,8:1 para 13:1.

Davies et al. (2011) investigaram o efeito da octanagem em um motor de injeção direta de gasolina equipado com turbocompressor (turbo). Constatou-se que a utilização de combustíveis com baixos valores de octanagem *MON* e valores elevados de octanagem *RON* resultaram em melhor desempenho, sugerindo que as especificações atuais de octanagem *MON* mínima podem ser prejudiciais à potência desses motores. No entanto, quando se produz um combustível com *RON* elevado e *MON* baixo, devem ser tomados cuidados para evitar uma formulação propensa à pré-ignição.

Prakash et al. (2013) realizaram testes de aceleração e potência em cinco veículos de luxo, utilizando duas gasolinas com índices antidetonante ($IAD=(MON+RON)/2$) 87 e 91. Os motores dos veículos eram equipados com sensores de detonação que indicam para a central eletrônica de comando para retardar o avanço de ignição quando detectada a detonação e, conseqüentemente, evitar a ocorrência do fenômeno. Com base em tal premissa, um combustível de baixa octanagem pode reduzir o torque do motor e, portanto, o desempenho do veículo. Por outro lado, com octanagem elevada o avanço de ignição pode ser maior, resultando em torques mais elevados. Os ensaios foram realizados em dinamômetro de chassi. Os resultados indicaram que alguns veículos foram mais sensíveis à variação da octanagem, sendo obtidos ganhos de até 5% de desempenho com a octanagem mais elevada. Em média, a gasolina com *IAD* 91 foi entre 1% e 2% melhor do que aquela com *IAD* 87.

Orlebar et al. (2014) investigaram os efeitos da octanagem sobre o desempenho, isto é, aceleração e potência de um veículo moderno dos EUA, alimentado por um motor de baixa cilindrada, turbo, e com injeção direta de gasolina. Os resultados indicaram uma melhoria de 3% quando utilizada uma gasolina de octanagem e sensibilidade elevadas (a gasolina base tinha a mesma sensibilidade, *S*). Em cargas parciais, a alta sensibilidade não demonstrou benefícios, devido à menor suscetibilidade à detonação. No entanto, o fato dos combustíveis com alta sensibilidade satisfazerem os requisitos de octanagem para cargas altas (com benefícios) e baixas (sem prejuízos) sugere que uma especificação mínima para a octanagem *MON* é indesejável no que se refere à tecnologia avaliada.

Stradling et al. (2015) realizaram testes em dois veículos leves europeus naturalmente aspirados, sendo um com injeção direta e outro com injeção *port fuel*. O desempenho dos veículos foi avaliado em condições de plena aceleração, com

uma ampla gama de combustíveis, incluindo misturas com etanol e ETBE. Os veículos foram projetados e otimizados para combustíveis com *RON* 95 e 98, respectivamente. Abaixo destes níveis de octanagem, os sistemas de controle dos motores atrasam o ponto de ignição para proteger contra a detonação, levando a um aumento do tempo de aceleração. O desempenho dos veículos foi mais influenciado pelo *RON* do que pelo *MON* e, de fato, o aumento do *MON* mostrou ser prejudicial para o desempenho. A presença de etanol ou de ETBE nas misturas de combustível não teve nenhum efeito sobre o tempo de aceleração que não a sua contribuição para aumentar a octanagem do combustível.

Milpied et al. (2009) apresentaram um estudo sobre os efeitos da qualidade dos combustíveis no desempenho de um motor do ciclo Otto com injeção direta de combustível e turbo. Foram avaliados, separadamente, os impactos de três importantes propriedades: octanagens *RON* e *MON*, bem como a entalpia de vaporização. O estudo confirmou a importância de altos valores de *RON* e da influência positiva do resfriamento da carga, ligado à elevada entalpia de vaporização, na resistência à detonação conferida pelo etanol. No entanto, nenhum impacto claro da octanagem *MON* foi notado. No caso de uma mistura de 20% em volume de etanol, o efeito de resfriamento da carga trouxe de 30% a 60%, dependendo da rotação do motor, de aumento total na resistência à detonação, em comparação a uma gasolina base.

Stansfield et al. (2012) utilizaram um veículo com motor de dois litros, turbo, com injeção direta de gasolina com diferentes gasolinas e misturas gasolinas/etanol/butanol. O desempenho do motor e alguns parâmetros do sistema de controle do motor e do veículo foram registrados para investigar a resposta de um veículo atual a gasolina com relação a diferentes teores de álcool. Observou-se aumento do desempenho com a elevação do teor de oxigênio do combustível. O desempenho com uma gasolina com octanagem *RON* 95 foi ligeiramente restrito pela ativação ocasional do sensor de detonação, retardando o avanço de ignição. Os combustíveis contendo álcoois não apresentaram detonação e foram capazes de usar o oxigênio adicional disponível para elevar a potência.

Stein et al. (2012) estudaram o etanol e outros combustíveis com elevada entalpia de vaporização. Tal característica resulta em um arrefecimento substancial da mistura ar-combustível, especialmente em motores com injeção direta. O efeito de arrefecimento combinado com a alta octanagem do etanol o torna um

combustível bastante resistente à detonação. Os tradicionais testes *RON* e *MON* usam carburação de combustível e, portanto, provavelmente não replicam o efeito do arrefecimento acima mencionado.

A resistência à detonação de uma matriz de misturas gasolina-etanol foi estudada em um motor monocilíndrico equipado com três sistemas de combustível: injeção de combustível a montante, pré-vaporizado (*UFI*); injeção de combustível no coletor de admissão (*PFI*); e injeção direta (*DI*). A comparação dos resultados com os sistemas *UFI* e *DI* permitiu a análise separada dos efeitos da octanagem e do resfriamento da carga sobre a ocorrência de detonação.

Para uma dada gasolina, quando se aumentou o conteúdo de etanol foi observada melhoria significativa no desempenho e eficiência térmica, especialmente no modo injeção direta. Os combustíveis com uma alta sensibilidade de auto-ignição (*RON-MON*), como é o caso do etanol, apresentaram melhor desempenho. O efeito da alta sensibilidade foi amplificado pelo arrefecimento de carga no caso da injeção direta. Os efeitos da octanagem e do resfriamento da carga possuem mesma ordem de importância para misturas com elevado teor de etanol. Com octanagem *RON* constante, o aumento do teor de etanol melhorou de forma significativa o desempenho do motor, para os combustíveis *RON 99* e *RON 97*. Esta tendência não foi aparente para combustíveis *RON 93*, devido à menor sensibilidade. Com teores de etanol em 10% e 20% em volume constantes, aumentar a octanagem *RON* da gasolina base também resultou em aumento significativo do desempenho com injeção direta. Aumentar a octanagem *RON* da gasolina sem etanol resultou em um aumento do desempenho, independente do modo de alimentação de combustível.

Stein et al. (2013) fornecem uma visão geral dos efeitos da mistura de etanol à gasolina para uso em motores de ignição por centelha. A visão geral é descrita para uso em veículos que suportem estas misturas. O aumento do teor de etanol resultou em um grande aumento da resistência à detonação, devido aos altos valores de *RON*, sensibilidade e entalpia de vaporização do etanol. Melhor resistência à detonação resultou em melhor desempenho, particularmente em motores de injeção direta e/ou com aumento da razão de compressão. O aumento do desempenho é consequência de maiores pressões nos cilindros do motor (maior avanço de ignição), que geram maior eficiência térmica, permitindo a redução da capacidade volumétrica do motor (*downsizing*) ou da rotação do motor (*downspeeding*). A

elevação da razão de compressão motivada pelo aumento do teor de etanol proporciona uma melhoria direta na eficiência. O aumento do conteúdo de etanol reduziu a temperatura dos gases de escape, devido a elevada entalpia de vaporização do etanol e também à maior capacidade calorífica dos produtos de combustão. Combinado com o maior avanço de ignição, isso resulta em enriquecimento reduzido e consequente melhoria da eficiência do motor.

2.3.2 Simulação do desempenho em motores e veículos

Esforços para prever o desempenho de veículos provavelmente começaram pouco depois de Karl Benz levar o seu primeiro triciclo para as ruas de Mannheim, Alemanha, em 1885. Um século mais tarde, computadores têm sido utilizados, melhorando a precisão do processo preditivo. O desafio tem sido o de atingir altos níveis de precisão da previsão para a maior variedade de configurações do veículo, funcionando em diferentes ambientes e fazê-lo com agilidade e menores custos (Faix, 1998).

No item 2.1.2 foram apresentados alguns softwares comerciais de simulação de motores, os quais possuem módulos que permitem a simulação não só do motor, mas de todos os sistemas que compõem os veículos. A presente seção irá focar na revisão de trabalhos cujas simulações, de motores ou veículos, tiveram alguma relação com a variação das propriedades dos combustíveis ou estudos numéricos que apresentaram resultados de precisão em relação aos respectivos resultados experimentais.

Millo et al. (2000) avaliaram a aplicação de métodos computacionais para o desenvolvimento de todo o sistema motor-veículo. Foram utilizados os programas *WAVE*, da Ricardo Inc. para a simulação unidimensional do motor e o programa *SIMUWIN*, desenvolvido pela *FIAT*, para a simulação do desempenho de veículos. A confiabilidade e a precisão da simulação computacional provaram poder proporcionar predições de desempenho de veículos confiáveis e perto dos valores medidos experimentalmente, com diferenças geralmente inferiores a 4%. Finalmente, técnicas de simulação foram aplicadas à análise do impacto das modificações no motor e no veículo e estes mostraram ser um poderoso e eficaz instrumento para a identificação de modificações que auxiliam no atingimento de metas de desempenho.

Anand et al. (2005) realizaram uma comparação detalhada do desempenho de um motor com ignição por centelha utilizando gasolina e gás natural. Para tanto, foi desenvolvido um modelo quase-dimensional de duas zonas utilizando o programa *HYDRA*, da Ricardo Inc.. Os resultados mostraram que a potência do motor foi reduzida quando alimentado por gás natural, devido à sua baixa eficiência volumétrica em relação aos combustíveis líquidos. Já em estado gasoso, o gás natural não demanda retirada de energia do ar do entorno para vaporização. Como consequência, o ar de admissão do motor não se resfria e não atinge massas específicas mais elevadas, o que contribuiria positivamente para a eficiência volumétrica. Mas, ambos os combustíveis exibiram quase a mesma eficiência térmica. A redução significativa das velocidades de propagação da chama com os hidrocarbonetos inferiores (metano, etano, propano) foi observada, com consequentes aumentos no atraso de ignição e na duração da combustão. A validação do modelo foi realizada com dados obtidos em motor monocilíndrico de mesma configuração com diferenças satisfatórias de até 5%.

Bougrine et al. (2009) desenvolveram a extensão de um modelo unidimensional pré-existente para simulação do desempenho de um motor com ignição por centelha, utilizando o programa *AMESim*. Esta extensão se baseou, principalmente, na combinação de uma nova correlação de velocidade da chama laminar, em um conjunto modificado de reações químicas na frente de chama e em uma correlação adaptada para a detonação. Os desenvolvimentos propostos foram validados por dados experimentais incluindo ampla faixa de funcionamento do motor, bem como misturas gasolina-etanol variando de 0% a 30% em volume. Foram observadas diferenças de até 3% para a pressão máxima no cilindro, de até 1 bar para o *IMEP* e de até 3 graus para o avanço de ignição em relação aos experimentos. Isso demonstrou, segundo os autores, que o modelo proposto é útil para a simulação do efeito de variações do combustível no desempenho de motores com ignição por centelha.

Najafi et al. (2009) analisaram experimentalmente o desempenho de um motor com ignição por centelha de quatro tempos operando com misturas de etanol-gasolina de 0%, 5%, 10%, 15% e 20%, em volume. Os resultados revelaram que o uso de misturas gasolina-etanol aumentou a potência e o torque do motor marginalmente. Verificou-se que o consumo específico de combustível diminuiu, enquanto as eficiências térmica e volumétrica foram mais elevadas. Um modelo de

redes neurais artificiais (modelos computacionais capazes de realizar aprendizagem automática e reconhecimento de padrões) foi desenvolvido para prever os resultados dos parâmetros acima mencionados. Foram utilizadas diferentes misturas de gasolina-etanol e rotações do motor como dados de entrada. Cerca de 70% dos dados experimentais foram usados para fins de construção do modelo, enquanto 30% foram utilizados para sua validação. Observou-se que o modelo pode prever o desempenho do motor com coeficiente de correlação (R) entre 0,97 e 1,00. Os erros médios relativos ficaram na faixa de 0,46% a 5,57%. Segundo os autores, este estudo demonstrou que a abordagem de redes neurais artificiais pode ser usada para prever com precisão o desempenho do motor em questão.

Skarohlid (2010) desenvolveu modelagem do calor liberado para três motores com a utilização da técnica de regressão linear multi-paramétrica, empregando grande quantidade de resultados experimentais. Composições de diferentes tipos de biogás (CO, CO₂, N₂, H₂, C₂H₆, C₃H₈ e C₄H₁₀) serviram como dados de entrada. O modelo de regressão iterativa foi implantado no modelo matemático de termodinâmica do motor no programa *GTPOWER*. Os resultados experimentais e modelados mostraram correspondência muito boa. Os desvios médios ficaram em torno de 5% para a liberação de calor, pressão máxima e pressão média efetiva indicada.

Melo et al. (2012) estudaram a influência das propriedades de misturas gasolina-etanol hidratado na combustão e no desempenho de motor flexível. O programa *BOOST* foi utilizado para simular diferentes condições operacionais, através de modelos de duas zonas Wiebe para a combustão e de Woschni para a transferência de calor. Foram calculadas a pressão máxima no cilindro e a pressão média efetiva indicada (*IMEP*). O modelo foi desenvolvido e validado a partir de testes experimentais feitos em bancada dinamométrica. Os resultados da modelagem apresentaram boa concordância com os dados experimentais para a pressão máxima, consumo de combustível e *IMEP*, apresentando diferenças inferiores a 5%.

Melo et al. (2014) utilizaram o programa *BOOST* para simular a pressão no interior do cilindro de um motor flexível utilizando misturas gasolina-etanol hidratado. As simulações foram realizadas utilizando modelo de combustão fractal, a fim de avaliar a sua capacidade de previsão para os combustíveis mencionados. Ao comparar as simulações e os dados experimentais, as diferenças máximas foram

inferiores a 6%. O modelo de combustão fractal desenvolvido apresentou, em geral, melhores resultados do que os publicados por Melo et al. (2012). Os autores destacam que não foram encontrados na literatura modelos preditivos para simular o desempenho de motores flexíveis.

Iliev (2015) desenvolveu um modelo unidimensional utilizando o programa comercial *BOOST* para prever o comportamento de um motor com ignição por centelha com injeção *port fuel* e calibrado para gasolina pura, utilizando misturas de gasolina e etanol/metanol, em até 50% em volume para diversas condições de funcionamento. Os resultados obtidos a partir da simulação foram comparados com aqueles obtidos para a gasolina pura, indicando que, quando o etanol e o metanol foram utilizados, a potência foi reduzida e o consumo específico de combustível aumentou. Segundo o autor, isso ocorreu devido ao menor poder calorífico dos álcoois.

Carvalho et al. (2015) apresentaram trabalho sobre a previsão do desempenho de gasolinas em motores de combustão interna como uma ferramenta auxiliar em pesquisas e desenvolvimento de novos combustíveis, reduzindo tempo experimental e custos. Foi proposto o uso de meta-krigagem com base nos resultados de testes dinamométricos de motor flexível, utilizando misturas distintas de iso-octano, n-heptano, tolueno e etanol para prever o desempenho em função das propriedades dos combustíveis e condições de operação. Os modelos foram construídos com uma abordagem simplificada para o método e os primeiros resultados apresentaram precisão satisfatória para torque, consumo específico de combustível e eficiência global, dentro de 3% em relação ao experimento. Tais diferenças foram consideradas adequadas na escolha de formulações candidatas para desenvolvimentos experimentais.

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 combustão, a eficiência e o desempenho de combustíveis em motores e veículos, tendo como foco a composição e as propriedades dos combustíveis. Foram identificados a evolução, o estágio atual das pesquisas nas áreas abordadas no presente trabalho e verificadas limitações e lacunas existentes desde as pesquisas científicas de base,

passando por experimentação e modelagem, até a aplicação final do combustível no motor.

No que se refere à combustão em motores, foram levantados trabalhos que propuseram diferentes expressões para o fator de turbulência utilizado na determinação da velocidade de queima turbulenta. Tais fatores se prestam a ajustar a velocidade de queima às condições de teste e aos equipamentos utilizados nos experimentos. No presente trabalho, foi introduzida uma modificação no fator de turbulência, representado pelo termo Re_{adr}^{ξ} em Machado (2012), onde seu expoente (ξ) foi adaptado por uma função matemática dependente do ângulo do eixo de manivelas e do avanço de ignição. Por sua vez, o avanço de ignição é representado por outra função, definida com base em características do combustível. Não foram encontradas publicações em que se tenha proposto a adaptação do fator de turbulência, conforme aquela apresentada no presente trabalho, constituindo, portanto, uma contribuição inédita.

Com relação à autonomia urbana, diversos trabalhos buscam predizer o seu valor utilizando programas comerciais de simulação. A abordagem geral tem foco na tecnologia dos motores e veículos, bem como em alterações nos seus parâmetros de funcionamento, como por exemplo, a pressão nos pneus. Foram encontradas publicações em que se buscou a correlação da autonomia com as propriedades dos combustíveis. Porém, estas não propuseram a mesma abordagem do presente trabalho. As emissões contendo carbono foram transformadas em conteúdo de CO₂ equivalente. Tais emissões foram correlacionadas às propriedades do combustível, gerando modelos de regressão. Por fim, a fórmula de cálculo da autonomia pelo método do balanço de carbono foi generalizada para contemplar as características específicas de cada combustível. A abordagem acima descrita, portanto, constitui mais uma contribuição inédita do presente trabalho.

Quanto ao desempenho em veículos, foi encontrada grande quantidade de publicações relacionando a performance dos motores e veículos com as propriedades dos combustíveis, notadamente a octanagem e a presença de oxigenados. Muitos trabalhos apresentaram modelos de desempenho desenvolvidos em programas comerciais. Alguns trabalhos propuseram modelos de regressão correlacionando o desempenho à octanagem. No entanto, nenhuma das publicações pesquisadas contemplou a modelagem do desempenho em veículos conforme a linha adotada no presente trabalho. Além da octanagem, outras propriedades dos

combustíveis foram consideradas, permitindo a diferenciação do desempenho com formulações de octanagem semelhante, por exemplo. Deve-se ressaltar ainda que os modelos foram desenvolvidos para veículos multicomcombustíveis que podem operar com até 100% de etanol. Portanto, esta modelagem constitui outra contribuição inédita deste trabalho.

Grande parte dos trabalhos encontrados buscou abranger tecnologias, combustíveis ou condições operacionais diversas. Seguindo a mesma linha, no presente trabalho, foram desenvolvidas metodologias inéditas que poderão ser implantadas para diferentes motores e veículos, com enfoque maior no que se refere à variação das propriedades dos combustíveis.