

10 Conclusões e Sugestões

Considerando os objetivos propostos, relacionados no Capítulo 3, e os resultados obtidos, descritos ao longo dos Capítulos 5 a 9, são resumidas de forma consolidada as conclusões do presente trabalho. Primeiramente são consideradas as conclusões referentes à proposição e identificação de formulações reduzidas representativas de gasolinas comerciais oxigenadas em motor comercial moderno. Em seguida são relacionadas as conclusões referentes à avaliação sistematizada da influência de componentes nas propriedades de combustíveis e nos parâmetros de desempenho e combustão do motor. Esta avaliação foi realizada sob ampla faixa de condições operacionais e incluiu a utilização de técnica de Planejamento e Análise de Misturas. Posteriormente, são consideradas à metodologia de determinação e resultados obtidos para as velocidades de propagação de chama em motor, com câmara de combustão de geometria complexa. Por fim, são tecidas as conclusões referentes ao estabelecimento dos critérios de conversão das velocidades de chama laminares de cada componente de formulações reduzidas em velocidades de propagação de chama turbulentas das misturas nas condições operacionais do motor.

Após as conclusões são relacionadas algumas sugestões para continuidade dos trabalhos.

10.1. Formulações reduzidas representativas de gasolinas comerciais oxigenadas

A partir da seleção de componentes representativos da gasolina e realização de testes experimentais em banco de provas de motor, foi possível identificar as formulações **B** (31,25% iso-octano, 31,25% tolueno, 12,5% n-heptano e 25% etanol) e **E** (37,5% iso-octano, 18,75%, tolueno, 18,75% n-heptano e 25% etanol) para utilização como formulações reduzidas representativas de gasolinas comerciais oxigenadas de alta octanagem, na medida em que seus desempenhos

são muito próximos. De uma maneira geral, todas as formulações reduzidas utilizadas, com os componentes iso-octano, tolueno, n-heptano e etanol, não apresentaram problemas operacionais em motor comercial moderno e poderiam ser adotadas para representar gasolinas oxigenadas nacionais com diferentes propriedades físico-químicas.

Na literatura não existem correlações diretas entre o comportamento de formulações reduzidas em experimentos básicos mais controlados (em queimadores, máquinas de compressão rápida, tubos de choque, entre outros) realizados para levantamento de parâmetros de combustão, incluindo o desenvolvimento de cinética química, e a habilidade da formulação reduzida em reproduzir o comportamento da gasolina em motor comercial de ignição por centelha. A contribuição dos resultados do presente trabalho consiste em iniciar a preencher esta lacuna, auxiliando pesquisadores ao sugerir componentes e formulações reduzidas representativas de gasolinas comerciais oxigenadas. As formulações reduzidas também podem ser utilizadas para estudo do efeito de componentes nos parâmetros de combustão e desempenho em motor, levando a novas formulações de combustíveis. Além disso, servem como base controlada para estudos de aditivos ou componentes específicos que influenciam características específicas do combustível, tais como: viscosidade, lubricidade, atomização, carbonização, formação de depósitos, octanagem, emissões, entre outras.

A relevância dos resultados foi atestada pela publicação de artigo técnico na revista *Fuel* da Elsevier (Machado et al., 2011).

10.2.

Influência de componentes de gasolina nos parâmetros de desempenho e combustão do motor

A utilização de formulações reduzidas de combustíveis associada à técnica de Planejamento e Análise de Misturas mostraram-se adequadas para investigar componentes de combustíveis, identificando e correlacionando suas influências nas propriedades dos combustíveis e nos parâmetros de desempenho e combustão em motor. Ficou evidenciado o potencial da metodologia para auxiliar na formulação de combustíveis.

Para muitas das variáveis de interesse avaliadas foram evidenciadas influências diferenciadas dos componentes e suas propriedades nos parâmetros de desempenho e combustão em motor, a depender da susceptibilidade ou não de ocorrência de detonação.

Considerando os componentes e formulações reduzidas utilizados no presente trabalho, para as condições operacionais susceptíveis à ocorrência de detonação podem ser relacionadas as seguintes conclusões:

- Iso-octano e tolueno elevam o torque, eficiência térmica e eficiência global do motor e reduzem o consumo específico de combustível;

- Tolueno contribui mais significativamente para aumentar a eficiência térmica, ao proporcionar maiores pressões de combustão, maiores valores de poder calorífico por kg de ar estequiométrico e melhores rendimentos volumétricos;

- Iso-octano e tolueno reduzem a eficiência mecânica, sendo que o tolueno contribui de forma mais significativa nesta redução, devido às maiores pressões de combustão;

- Iso-octano e tolueno melhoram a estabilidade de combustão favorecendo a operação mais suave do motor e a dirigibilidade;

- N-heptano e iso-octano são importantes na redução do consumo de combustível, sendo o n-heptano mais efetivo do que o iso-octano;

- Iso-octano é mais efetivo que o tolueno em reduzir o consumo específico e melhorar a eficiência global porque contribui simultaneamente para elevar o torque e reduzir o consumo de combustível.

Por sua vez, para as condições operacionais não susceptíveis à ocorrência de detonação, podem ser relacionadas as seguintes conclusões:

- N-heptano e iso-octano reduzem o consumo de combustível e o consumo específico e melhoram a eficiência de combustão, aumentando a eficiência global do motor. Isto ocorre em função de suas maiores relações ar-combustível estequiométricas e estruturas moleculares mais simples, que facilitam suas quebras;

- A relação ar-combustível estequiométrica e a estrutura molecular dos componentes são parâmetros importantes para classificação de combustíveis. Este fato pode ser uma consideração relevante em aplicações especiais, incluindo formulações para motores de elevadas velocidades rotacionais como pode ser o caso de motores para motocicletas e motores de competição. Neste caso, o IAD pode não ser um parâmetro tão importante, devido aos menores tempos disponíveis para ocorrência de detonação. Motores estacionários operando em condições não sujeitas à detonação também podem ser favorecidos por uma seleção adequada da formulação, que privilegie maiores relações ar-combustível estequiométricas e estruturas moleculares mais simples dos componentes.

Independentemente da condição operacional e susceptibilidade de ocorrência de detonação, também podem ser relacionadas outras conclusões:

- Apesar da pequena diferença entre os combustíveis, a relação ar-combustível estequiométrica influenciou o consumo de combustível. Formulações com maiores relações ar-combustível estequiométricas apresentaram menores consumos de combustível, favorecendo as formulações com maiores teores de n-heptano e iso-octano. O n-heptano foi sempre mais efetivo que o iso-octano na redução do consumo de combustível;

- A relação ar-combustível estequiométrica também influenciou a eficiência volumétrica, favorecendo as formulações com maiores teores de tolueno;

- N-heptano e iso-octano melhoram a eficiência de combustão;

- O iso-octano mostrou-se mais versátil que os demais componentes, na medida em que possui elevada octanagem, elevada relação ar/combustível estequiométrica e estrutura molecular relativamente simples, contribuindo para melhorar a eficiência global do motor em todas as condições operacionais, independentemente da ocorrência de detonação.

Devido ao comportamento característico e diferenciado das emissões medidas em concentração volumétrica e das emissões específicas em g/kWh, suas conclusões são apresentadas separadamente. Com relação às emissões medidas em concentração volumétrica, podem ser relacionadas as seguintes conclusões:

- As características moleculares dos diferentes combustíveis e o consumo de combustível apresentaram maior impacto sobre as emissões do que à susceptibilidade de ocorrência de detonação e condições de calibração do motor;

- Tolueno contribuiu de forma mais significativa para elevar os níveis de emissões de CO₂ e CO, em função de sua influência no aumento das frações molares de carbono, aumento das frações molares de oxigênio e pelos maiores consumos de combustível das formulações com maiores teores deste componente. As menores eficiências de combustão das formulações com maiores teores de tolueno também contribuíram para as maiores emissões de CO destas formulações;

- N-heptano e iso-octano contribuem para redução de CO₂ e CO, em função dos seus menores consumos de combustível, menores frações molares de carbono e oxigênio;

- N-heptano contribuiu de forma mais significativa para redução conjunta de CO e HC, devido à sua melhor eficiência de combustão;

- Iso-octano contribuiu para elevar de forma mais significativa os níveis de emissões de HC, provavelmente devido à influência na maior disponibilização de átomos de hidrogênio e contribuição na redução do conteúdo de oxigênio das formulações em relação ao tolueno, associada à menor eficiência de combustão em relação ao n-heptano. A presença de hidrogênio e a eficiência de combustão têm influência direta na difusão do combustível na camada de óleo e na retenção do combustível no espaçamento entre pistão e cilindro, respectivamente. Estes são os mecanismos principais da emissão de HC nos motores. Além disto, a maior massa molecular do iso-octano em relação aos demais componentes utilizados também favorece sua maior solubilidade na camada de óleo lubrificante sobre o cilindro, com dessorção durante o tempo de expansão, aumentando as emissões de HC.

Considerando as emissões em g/kWh, podem ser relacionadas as seguintes conclusões:

- Para as emissões de CO₂ e CO, a calibração do motor nas condições operacionais passíveis de detonação exerceu forte influência, modificando as

tendências das emissões medidas em concentração volumétrica. Neste caso, as formulações com maiores teores de n-heptano passaram a apresentar os maiores níveis de emissões. Para estas condições operacionais, as formulações com maiores teores de iso-octano apresentaram os menores níveis de emissões, devido aos maiores torques desenvolvidos em relação aos demais componentes, associado aos menores consumos de combustível e menores emissões em concentração volumétrica em relação ao tolueno. O consumo de combustível e a eficiência de combustão tenderam a influenciar de forma mais significativa as condições operacionais não passíveis de detonação, favorecendo a redução das emissões das formulações com maiores teores de n-heptano;

- Para as emissões de HC as tendências encontradas nas emissões medidas em concentração volumétrica foram mantidas nas emissões em g/kWh, tanto nas condições passíveis como não passíveis de detonação. Isto ocorreu devido às maiores diferenças encontradas para as emissões em concentração volumétrica das diferentes formulações, de tal forma que estas influenciaram mais significativamente as emissões em g/kWh. Neste caso, as formulações com maiores teores de n-heptano continuaram apresentando os menores níveis de emissões, enquanto as formulações com maiores teores de iso-octano continuaram apresentando os maiores níveis de emissões de HC.

10.2.1.

Comentários gerais e consolidação da influência dos componentes nos parâmetros de desempenho e combustão do motor

Pelas conclusões relacionadas nas Seções 6.3 e 7.3, nota-se que 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, melhora na eficiência de combustão e aumento de eficiência global, com redução de emissões de CO e HC, sem elevar consideravelmente os níveis de CO₂. Sua proporção no combustível dependerá do projeto do motor e seu requisito de octanagem mínima. Motores com baixas razões de compressão e motores estacionários, que operem em condições não susceptíveis à detonação, podem ser favorecidos pela utilização de maiores teores de n-heptano. Aplicações de elevada rotação, como em motocicletas e motores de competição, também poderiam suportar teores maiores do n-heptano, na medida

em que existe menor tempo disponível para ocorrência das reações precursoras da autoignição e detonação. Independentemente da susceptibilidade de ocorrência de detonação, se o controle dos níveis de emissões para determinada aplicação adotar medição em concentração volumétrica, como é comum nos programas de inspeção de frotas, as formulações com maiores teores de n-heptano são favorecidas, tendendo, de uma maneira geral a reduzir as emissões.

Por sua vez, para aplicações onde haja requisito de octanagem mínima elevada, como em motores de elevadas razões de compressão, tolueno e iso-octano são componentes importantes para aumentar o desempenho e reduzir as emissões de CO₂ e CO em g/kWh. A utilização do iso-octano pode ser mais vantajosa que a utilização do tolueno pela maior eficiência de combustão. Este componente também apresentou tendência de maior eficiência global e menores emissões de CO₂ e CO em relação ao tolueno. Por outro lado, foi o tolueno que apresentou tendência de contribuir mais significativamente para aumentar a eficiência térmica. Suas maiores pressões de combustão e perdas mecânicas impediram que a maior eficiência térmica fosse traduzida em maior eficiência global. Eventualmente, para aplicações com velocidades de rotação menores, com menores perdas por atrito, o tolueno poderá apresentar desempenho superior na eficiência global. O tolueno também contribuiu para menores emissões de HC em relação ao iso-octano.

De uma maneira 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.

Nota-se claramente o compromisso que existe entre diversos parâmetros de desempenho e combustão, o que evidencia a necessidade de se verificar a importância relativa de cada parâmetro em função do projeto do motor e sua aplicação, para se buscar uma formulação de combustível mais adequada e eficiente. Estes compromissos e análises para adequação da formulação ao motor tornam-se mais importantes em aplicações onde pequenas diferenças nos parâmetros de desempenho podem representar grandes diferenças no resultado final desejado. Exemplificando, podem-se citar as categorias de esporte-motor, em especial a fórmula 1, e aplicações em operações estabilizadas por longos períodos, como pode ser o caso de aplicações para geração de energia.

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. As n-parafinas são comuns em naftas de destilação direta, as iso-parafinas estão presentes em grandes concentrações nos produtos dos processos de alquilação e isomerização, enquanto os aromáticos são abundantes nos reformados. 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.

Estas conclusões foram apresentadas abordando os aspectos qualitativos dos resultados, que podem auxiliar na formulação de combustíveis. Os modelos matemáticos gerados permitem estimar o efeito de cada componente nas variáveis de interesse. Deve-se ressaltar que a metodologia permite a obtenção de modelos preditivos (quantitativos), desde que estes reúnam todos os critérios de validade necessários. A predição quantitativa, no entanto, será válida somente para o motor avaliado, sendo mais importante a extração de tendências que possam ser generalizadas, quando suportadas pela coerência física.

10.3. Velocidades de propagação de chama no motor

As velocidades médias de propagação de chama para o intervalo angular de queima rápida (10 a 90% de X_b), calculadas a partir das velocidades instantâneas, apresentaram resultados coerentes. Foi observada a mesma ordem de grandeza e valores superiores em relação às velocidades calculadas utilizando outras técnicas reportadas na literatura para motores de teste monocilindros, de geometria de câmara simples e razões de compressão baixas. Os resultados também se mostraram coerentes com cálculos de velocidades médias de propagação de chama realizados a partir da duração total de combustão (0 a 100% de X_b), velocidade de rotação e distância entre a posição da vela e o raio da borda do pistão na posição angular de fim de queima. As coerências encontradas validam a

metodologia adotada para cálculo das velocidades de propagação instantâneas e médias no interior do motor.

Desta forma, a metodologia adotada se mostra adequada para realização de estimativas de velocidades de propagação de chama nos motores comerciais modernos, de geometrias de câmaras de combustão complexas e razões de compressão elevadas.

Com relação às análises da influência dos componentes nas velocidades médias de propagação de chama, houve sintonia com os resultados observados para a influência dos componentes no intervalo angular de queima rápida, o que reforça as tendências observadas.

Houve uma inversão de tendências em relação às velocidades de chama laminares das formulações. O comportamento observado sugere que a avaliação isolada da velocidade de chama laminar tem uma importância relativa quando se busca otimizar a interação combustível – motor. Na seleção de componentes e desenvolvimento de formulações de combustíveis, a velocidade de chama laminar deve sempre ser associada a outras propriedades físico-químicas dos combustíveis e parâmetros de calibração do motor. Sua importância poderá ser relativamente maior ou menor, a depender da aplicação desejada.

Particularmente o tolueno se mostrou um componente interessante por contribuir para acelerar as velocidades de propagação de chama turbulentas no interior do motor, independentemente do comportamento laminar. Tal fato, associado a sua elevada octanagem, pode ser uma consideração importante para aplicações com requisito de octanagem mínima elevada, que privilegiem otimização de torque. A princípio estas conclusões poderiam ser extrapoladas de forma qualitativa para a família dos aromáticos.

A existência de um comportamento médio semelhante entre as velocidades de propagação de chama turbulentas em diferentes condições operacionais do motor sugeriu a existência de um padrão funcional na transformação das velocidades de chama laminares dos combustíveis em velocidades de propagação de chama no interior do cilindro. Este padrão foi materializado a partir do desenvolvimento de duas relações funcionais de transformação, baseadas nas condições termodinâmicas no interior do cilindro e no escoamento na admissão do motor.

10.4.

Critérios para conversão das velocidades de chama laminares dos combustíveis em velocidades de propagação de chama turbulentas no motor

Foram desenvolvidas duas relações para transformação das velocidades de chama laminares dos combustíveis na condição padrão em velocidades de propagação de chama turbulentas médias no interior do motor. Os dados de entrada das relações são as pressões médias e temperaturas médias da mistura não queimada no intervalo angular de 10% a 90% de fração de massa queimada e o Reynolds de admissão médio. A observância de comportamentos típicos para plena carga e carga parcial conduziu ao estabelecimento de relações próprias para cada condição de carga.

A ausência de constantes de ajuste para as relações desenvolvidas, a confirmação da dependência com o quadrado da temperatura, os valores dos expoentes encontrados na dependência com o Reynolds de admissão, coerentes com dados de motores *MIT*, e a baixa influência da pressão, identificada por expoentes de dependência relativamente baixos, sugerem uma generalidade das relações para outros motores.

A importância e contribuição das relações desenvolvidas residem tanto na possibilidade de sua utilização para estimativa das velocidades de propagação de chama no interior do motor, a partir das velocidades de chama laminares dos combustíveis na condição padrão, como no caminho inverso, ou seja, obtenção de estimativas para as velocidades de chama laminares de combustíveis na condição padrão, a partir de dados obtidos com ensaios experimentais em motor, de mais simples execução que os equipamentos e métodos sofisticados tradicionalmente utilizados. Pode-se, por exemplo, realizar um ensaio experimental no motor em determinada condição operacional para se estimar a velocidade de chama laminar do combustível na condição padrão e, a partir daí, calcular as velocidades de propagação de chama em outras condições operacionais do motor e levantar os demais parâmetros de combustão via simulação.

Foram introduzidas novas possibilidades para estimativas das velocidades de propagação de chama nos simuladores de motores, dispensando-se a necessidade de utilização de um fator de turbulência da forma usualmente adotada, após correção da velocidade laminar na condição padrão pela pressão e

temperatura, usando expoentes de regime laminar. Conforme ficou evidenciado, os expoentes de pressão típicos de regime laminar não são adequados para as condições típicas nos motores.

A qualidade das relações desenvolvidas sugere que, apesar das simplificações e hipóteses assumidas, a modelagem como um todo conseguiu capturar de forma adequada os aspectos físicos envolvidos no processo de combustão e propagação da chama. A eliminação natural da necessidade de utilização de constantes de ajustes reforça a coerência física da metodologia e das relações desenvolvidas.

Houve semelhanças de tendências gerais médias entre as velocidades de propagação de chama calculadas a partir de dados experimentais e as reconstruídas a partir das relações desenvolvidas. Tal fato sugere que as estimativas de velocidades de chama laminares de misturas de componentes na condição padrão podem ser obtidas a partir da combinação linear de suas velocidades individuais ponderadas pelas frações molares de mistura. Para misturas complexas esperam-se comportamentos e sinergias mais complexas, porém os resultados sugerem que elas não devem ser tão fortes e que as influências de calibração e condições termodinâmicas no motor produzem efeitos mais significativos. A precisão da combinação linear já seria suficiente em função de várias outras simplificações necessárias para se realizar a simulação de motores. Além disso, para ser útil e mais barata que os ensaios experimentais, as simulações não devem ser complexas, exigindo longos tempos para levantamento de parâmetros, muitos dos quais através de ensaios experimentais.

A modelagem desenvolvida para a velocidade de propagação de chama turbulenta no motor foi capaz de segregar a influência das condições operacionais da influência da velocidade de chama laminar, que é função única dos componentes das formulações, diferentemente do que ocorre com os parâmetros da lei de Wiebe. Este fato permitiu que se realizasse a conversão das tendências observadas para as velocidades laminares dos combustíveis na condição padrão para as tendências particulares observadas para as velocidades de propagação de chama no motor.

10.5. Sugestões

Com relação às sugestões para continuidade dos trabalhos podem ser relacionadas as seguintes atividades:

- Utilização das formulações reduzidas, identificadas neste trabalho como representativas de gasolinas comerciais oxigenadas, para levantamento de parâmetros de combustão, tais como retardo de ignição, velocidades de chama laminares entre outros, através de experimentos controlados em equipamentos tais como queimadores, câmaras de volume constante, tubos de choque, etc. Estes parâmetros poderão auxiliar no desenvolvimento de mecanismos cinéticos reduzidos representativos de gasolinas, com aplicação na simulação da combustão em motores;

- Utilização das formulações reduzidas para estudos sistematizados de componentes de combustíveis através de substituições controladas de outros componentes representativos não considerados no presente trabalho, incluindo componentes alternativos de interesse;

- Utilização da técnica de Planejamento e Análise de Misturas para desenvolvimento de combustíveis e biocombustíveis de uma maneira geral, incluindo análise da influência de correntes de processos utilizadas em formulações nos parâmetros de desempenho e combustão em motor;

- Associar a técnica de Planejamento e Análise de Misturas com ferramentas de otimização para maximizar variáveis e compromissos de interesse na formulação de combustíveis em geral e para aplicações especiais;

- Quando possível, aumentar ou balancear o número de formulações para incluir regiões mais próximas dos vértices do triângulo, ou das extremidades do domínio considerado, para melhorar a predição nestas regiões;

- Utilização da metodologia adotada no presente trabalho, para cálculo das velocidades instantâneas de propagação de chama, em estudos de interação da chama com a geometria da câmara de combustão e superfície do pistão. Estes estudos têm aplicação na otimização de projetos de câmara de combustão, pistão e posicionamento da vela de ignição;

- Utilização das relações desenvolvidas no presente trabalho, para transformação das velocidades laminares na condição padrão em velocidades de propagação de chama no interior do motor, com o intuito de considerar a influência do combustível nas simulações de motores;

- Levantamento de um banco de dados de velocidades de chama laminares na condição padrão de componentes e correntes utilizadas em formulações de combustíveis utilizando métodos experimentais ou simulações em programas como o *Chemkin*, da *Reaction Design*. Isto poderá ser feito utilizando a infraestrutura laboratorial que está sendo implementada nas redes temáticas estruturadas pela Petrobras. Estes dados permitirão a realização de estimativas das velocidades de chama laminares de misturas e combustíveis comerciais para utilização em simulação de motores;

- Estimativa das velocidades de chama laminares na condição padrão de componentes e correntes de processos utilizados em formulações de combustíveis, a partir de ensaios experimentais em motor, utilizando a metodologia e as relações desenvolvidas no presente trabalho. Comparação destas estimativas com as velocidades obtidas com os equipamentos e métodos tradicionais para avaliação das diferenças encontradas e implementação de melhorias na modelagem;

- A partir de adaptações com a modelagem proposta, utilização de simuladores de motores, tais como o *BOOST*, *FIRE*, *CARE*, entre outros, para desenvolvimento de combustíveis, atuando na seleção prévia de formulações com maiores potencialidades para realização de testes em motores. Desta forma, pode-se reduzir o número de ensaios experimentais em motor e os custos de desenvolvimento.

- A metodologia de propagação da chama poderia ser modificada para se adaptar aos novos sistemas de injeção direta de combustíveis, tanto para os casos de misturas homogêneas como para misturas estratificadas.