



**Matheus Barros Freires**

**Simulação numérica da combustão em  
motores marítimos de misturas ternárias com  
biodiesel e etanol**

**Projeto de Graduação**

Projeto de Graduação apresentado ao Departamento de Engenharia Mecânica da PUC-Rio.

Orientador : Florian Pradelle  
Coorientadora: Epifânio Mamani Ticona

Rio de Janeiro  
JULHO de 2024

## **Agradecimentos**

Primeiramente agradeço a Deus por ter me dado força e capacidade de alcançar essa conquista. Com perseverança e fé, consegui vencer minhas batalhas.

Agradeço a minha família, por sempre terem me apoiado e incentivado buscar uma transformação de vida através dos estudos. Em especial a minha mãe que sempre fez o possível e impossível para me criar da melhor forma possível. Aos meus irmãos Daniel e Fernanda, por sempre me ouvirem e apoiarem nos momentos difíceis. E por último a minha vó, que embora não esteja mais aqui, foi e continua sendo uma inspiração e exemplo para mim, e sem ela, essa conquista jamais teria sido possível.

Ao departamento de Engenharia Mecânica, por ter fornecido as máquinas e a licença necessária para realizar as simulações, além de me fornecerem suporte e uma educação de qualidade durante o curso.

Ao meu orientador, Florian Pradelle, pela oportunidade de desenvolver uma pesquisa nesse tema, e pela paciência e ajuda que me forneceu para a conclusão desse trabalho.

E a todos os meus amigos que foram fundamentais e que me apoiaram nas horas de estudo e desenvolvimento acadêmico, pessoal e profissional.

## Resumo

### **Simulação numérica da combustão em motores marítimos de misturas ternárias com biodiesel e etanol**

O processo de transição energética é fundamental para redução das emissões dos gases de efeito estufa na atmosfera. O setor marítimo, responsável por 3% das emissões globais, também é uma peça importante para a transição. A Organização Marítima Internacional tem como meta, até 2030, operar com uma mistura contendo pelo menos 5% de biocombustíveis na concentração do diesel marítimo convencional. O seguinte estudo tem como foco avaliar o impacto de combustão de misturas ternárias contendo diesel marítimo e biocombustíveis como etanol e biodiesel, sob diferentes concentrações na mistura através da ferramenta de simulação numérica CONVERGE CFD. As simulações ocorreram em um motor pré modelado pelo software com os seguintes parâmetros: 2440 cilindradas, razão de compressão de 16 e velocidade de rotação de 1600 rpm. Essa configuração se manteve a mesma para todas as simulações das 8 misturas envolvidas, são elas: 100% de diesel marítimo (DIESEL), 3 misturas binárias contendo 5%, 15% e 30% de etanol na mistura com diesel marítimo (DE05, DE15 e DE30, respectivamente), seguida por uma mistura binária de 20% de biodiesel com a mistura de diesel marítimo (B20), finalizando com 3 misturas ternárias contendo 20% de biodiesel e concentrações variáveis de etanol (5%, 15% e 30%) na mistura de diesel marítimo (B20E05, B20E15 e B20E30, respectivamente). As misturas contendo biodiesel demonstraram resultados promissores com relação a taxa de liberação de calor, a mistura B20E30 demonstrou o melhor resultado, com um acréscimo de 42,82% comparado ao DIESEL, além de ter a maior eficiência entre as misturas 4,17% acima do DIESEL. Entretanto, essa mistura demonstrou o pior resultado nas emissões de fuligem e CO<sub>2</sub>, com o aumento de 19,67% e 17,02% comparado ao DIESEL, respectivamente. O B20 demonstrou os melhores resultados para a redução das emissões de HC e CO comparado ao DIESEL, com reduções de 72,72% e 73,61%, respectivamente. O uso do etanol com diesel marítimo impactou negativamente as emissões. O DE30, demonstrou o pior resultado nas emissões de NO<sub>x</sub>, HC e CO, com acréscimo de 19,67%, 4,80% e 5,58% respectivamente.

### **Palavras-chave**

Combustão; Simulação numérica; biodiesel; etanol misturas ternárias.

## Abstract

### Numerical simulation of combustion in marine engines of ternary mixtures with biodiesel and ethanol

The energy transition process is fundamental for reducing greenhouse gas emissions in the atmosphere. The maritime sector, responsible for 3% of global emissions, is also a crucial player in the transition. The International Maritime Organization aims to operate with a mixture containing at least 5% biofuels in conventional marine diesel fuel by 2030. This study focuses on evaluating the combustion impact of ternary mixtures containing marine diesel and biofuels such as ethanol and biodiesel at different concentrations using the numerical simulation tool CONVERGE CFD. The simulations were conducted in a pre-modeled engine by the software with the following parameters: 2440 cc displacement, a compression ratio of 16, and a rotational speed of 1600 rpm. This configuration remained the same for all simulations of the 8 involved mixtures, which are: 100% marine diesel (DIESEL), 3 binary mixtures containing 5%, 15%, and 30% ethanol in the marine diesel mixture (DE05, DE15, and DE30, respectively), followed by a binary mixture of 20% biodiesel with the marine diesel mixture (B20), and finally 3 ternary mixtures containing 20% biodiesel and varying ethanol concentrations (5%, 15%, and 30%) in the marine diesel mixture (B20E05, B20E15, and B20E30, respectively). The mixtures containing biodiesel demonstrated promising results regarding the heat release rate, with the B20E30 mixture showing the best result, with an increase of 42.82% compared to DIESEL, in addition to having the highest efficiency among the mixtures, 4.17% above DIESEL. However, this mixture showed the worst results in soot and  $CO_2$  emissions, with increases of 19.67% and 17.02% compared to DIESEL, respectively. The B20 showed the best results for reducing HC and CO emissions compared to DIESEL, with reductions of 72.72% and 73.61%, respectively. The use of ethanol with marine diesel negatively impacted emissions. The DE30 showed the worst results in  $NO_x$ , HC, and CO emissions, with increases of 19.67%, 4.80%, and 5.58%, respectively.

## Keywords

Combustion; Numerical Simulation; biodiesel; ethanol ternary blends.

# Sumário

1	Introdução	8
2	Objetivos	11
3	Revisão Bibliográfica	12
3.1	Motores de Combustão Interna com ignição por compressão	12
3.2	Modelagem da Combustão	14
3.2.1	Equilíbrio termodinâmico e minimização da energia livre de Gibbs	14
3.2.2	Modelo de Wiebe	15
3.2.3	Modelo de Wiebe de duas zonas	16
3.2.4	Cinética das reações no CFD	17
	Equações do volume de controle	17
	Modelagem da turbulência	19
3.3	Distribuição dos combustíveis no motor	20
3.3.1	Óleo Diesel Marítimo	20
3.3.2	Biodiesel	22
3.3.3	Etanol	24
3.3.4	Misturas binárias e ternárias	25
4	Metodologia de simulação no Converge	31
4.0.1	Definição da geometria	31
4.0.2	Dados temporais da simulação	33
4.0.3	Definição dos produtos	33
4.0.4	Injeção dos componentes	35
4.1	Parâmetros calculados	38
5	Resultados e Discussão	40
5.0.1	Eficiência das simulações	40
5.0.2	Massa injetada	41
5.1	Simulação Diesel + Etanol	41
5.1.1	Taxa de Liberação de Calor	42
5.1.2	Pressão e Temperatura Máxima	44
5.1.3	Emissões	45
5.2	Simulação Diesel + Etanol + Biodiesel	47
5.2.1	Taxa de Liberação de Calor	48
5.2.2	Pressão e Temperatura Máxima	49
5.2.3	Emissões	51
5.3	Misturas binárias x Ternárias	53
5.3.1	Taxa de liberação de calor	53
5.3.2	Pressão e Temperatura Máxima	53
5.3.3	Emissões	54
6	Conclusão	55

## Lista de figuras

1.1	Emissões globais dos gases de efeito estufa por setor [2]	8
1.2	Emissões dos gases de efeito estufa no setor de energia [3]	9
1.3	Metas IMO – 2011 à 2050 [8]	10
3.1	Ciclo Diesel de 4 tempos [10]	13
3.2	Ciclo Diesel ideal [10]	13
3.3	Resultados de Torque e Potência do uso dos biocombustíveis [12]	27
3.4	Emissões de fuligem e de $NO_x$ [12]	28
3.5	Variação das emissões de $NO_x$ em função da carga [29]	29
3.6	Variação das emissões de $CO_2$ em função da carga [29]	30
4.1	Geometria escolhida para a simulação	32
4.2	Projetos disponíveis no Converge	34
4.3	Tela de configuração de misturas ternárias	36
4.4	Configuração da mistura do B20	37
4.5	Configuração do injetor utilizado	38
4.6	Pressão de injeção na câmara	38
5.1	Massa injetada na câmara	41
5.2	Massa de diesel injetada nas misturas ternárias de etanol	42
5.3	Massa de etanol injetada nas misturas ternárias de etanol	42
5.4	Taxa máxima de liberação de calor com o uso de etanol	43
5.5	Taxa de liberação de calor com o uso de etanol detalhada	43
5.6	Perfil de pressão máxima das misturas de etanol	44
5.7	Perfil de pressão máxima durante o processo de combustão das misturas de etanol	44
5.8	Perfil de temperatura das misturas contendo etanol	45
5.9	Emissões de $NO_x$ com o uso de etanol	46
5.10	Emissões de fuligem com o uso de etanol	47
5.11	Emissões de fuligem totais com o uso do etanol	47
5.12	Carregamento de diesel no motor	48
5.13	Carregamento de etanol no motor	48
5.14	Taxa de liberação de calor nas misturas com biodiesel + etanol	49
5.15	Taxa de liberação de calor detalhada nas misturas com biodiesel + etanol	49
5.16	Pressão máxima durante a simulação de biodiesel + etanol	50
5.17	Pressão Máxima detalhada durante as simulações de biodiesel + etanol	50
5.18	Temperatura máxima durante as simulações de biodiesel + etanol	51
5.19	Emissão de $NO_x$ nas misturas de biodiesel + etanol	52
5.20	Emissão de fuligem nas misturas de biodiesel + etanol	52
5.21	Emissão detalhada de fuligem nas misturas ternárias	53

## Lista de tabelas

3.1	Tabela com os parâmetros do Óleo Combustível Marítimo [13]	21
3.2	Tabela com os parâmetros do Óleo Diesel Marítimo [13]	22
3.3	Tabela com os parâmetros do biodiesel [12]	24
3.4	Tabela com os parâmetros do etanol [12]	25
4.1	Parâmetros do motor	33
4.2	Parâmetros das misturas	35
5.1	Tabela de simulações	40
5.2	Taxa de liberação de calor das misturas com etanol	42
5.3	Pressões e Temperaturas máximas das misturas de diesel e etanol	45
5.4	Emissões das misturas binárias de diesel marítimo com etanol	46
5.5	Taxa de Liberação de calor das misturas contendo biodiesel e etanol	48
5.6	Pressões e Temperaturas Máximas das misturas contendo biodiesel e etanol	50
5.7	Emissões das misturas ternárias contendo diesel marítimo, etanol e biodiesel	51

# 1 Introdução

O agravamento do efeito estufa nos últimos anos fez com que a temperatura média global subisse  $1,1^{\circ}\text{C}$  no período de 2011 – 2020, quando comparado com 1850 – 1900. Isso se deve principalmente à ação humana, que contribui para o aumento da concentração dos Gases do Efeito Estufa (GEE) na atmosfera como o dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), metano ( $\text{CH}_4$ ) e óxido nitroso ( $\text{N}_2\text{O}$ ). [1]

O  $\text{CO}_2$  em especial é o principal gás agravador do efeito estufa. Em 2016 foram emitidos ao todo 49,4 bilhões de toneladas de  $\text{CO}_2$  na atmosfera, dentre essas, 73,3% eram responsáveis pelo setor de energia, como visto na figura 1.1. Dentre os subsetores da seção de energia, 16,2% foram emissões provenientes do setor de transportes, como visto na figura 1.2. [2] Em 2019, o setor de transportes demonstrou uma queda percentual, sendo responsável por aproximadamente 15% de toda a emissão global de  $\text{CO}_2$  na atmosfera. [3]

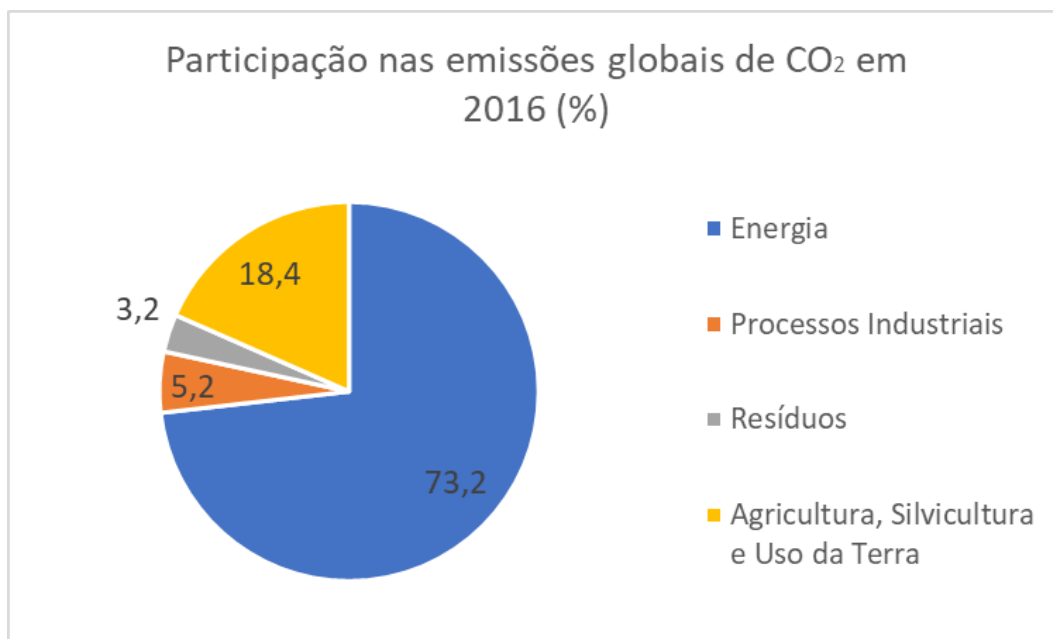


Figura 1.1: Emissões globais dos gases de efeito estufa por setor [2]



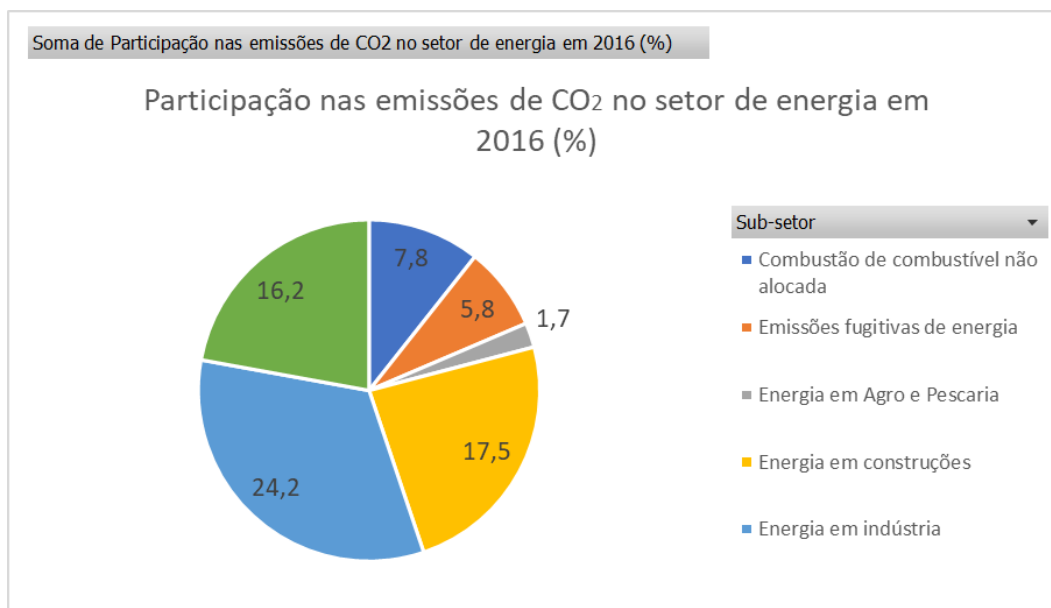


Figura 1.2: Emissões dos gases de efeito estufa no setor de energia [3]

A UNEP concluiu em seu último relatório, "*Emissions Gap Report 2023*", que até 2030, é necessário que haja uma redução de até 28% das emissões de gases do efeito estufa para que o aumento da temperatura global do planeta suba somente até 2°C, e uma redução de 42% para que a temperatura se eleve 1,5°C.[4]

O setor de transportes é alimentado principalmente por combustíveis fósseis como o Diesel e a Gasolina, que quando sofrem a reação química da combustão completa, produzem CO<sub>2</sub> não biogênico, contribuindo para o agravamento do efeito estufa. Dessa forma, torna-se imprescindível buscar formas de reduzir as emissões causadas por combustíveis fósseis. [1]

Nesse cenário de redução das emissões e de desenvolvimento de fontes menos poluente de energia, a transição energética no setor de transportes busca obter não só combustíveis mais eficientes, mas também incrementar o uso de biocombustíveis. [5] No setor rodoviário brasileiro, a mistura de diesel com biodiesel e de gasolina com etanol é obrigatória por lei. Em 2024, a porcentagem de etanol na gasolina passou a ser 27%, enquanto a de biodiesel chega a 14% no diesel. [6]

Entretanto, a aplicação de biocombustíveis em transportes marítimos ainda está no campo de pesquisa e desenvolvimento. A mistura de óleo diesel marítimo (ODM) hoje é isenta de biodiesel em sua composição. [7]

No panorama global, os transportes marítimos são de extrema importância para o comércio mundial, sendo responsáveis por aproximadamente 90% das transações e gera cerca de 3% das emissões globais. [8]

A Organização Marítima Internacional (IMO) almeja, até 2050, atingir uma meta de abdicar de quase todas as tecnologias, combustíveis ou técnicas que gerem gases do efeito estufa para transportes marítimos internacionais. Além disso, a IMO também possui como objetivo a redução da emissão de  $CO_2$  de transportes internacionais em até 40% e de que pelo menos 5% dos combustíveis sejam de fontes limpas, emitindo quase nenhum gás agravante do efeito estufa até 2030, como visto na figura 1.3. [9] O etanol e o biodiesel são alternativas viáveis para atingir essa meta, levando em conta que já são amplamente utilizados no mercado, possuindo uma cadeia de valor madura. [10]

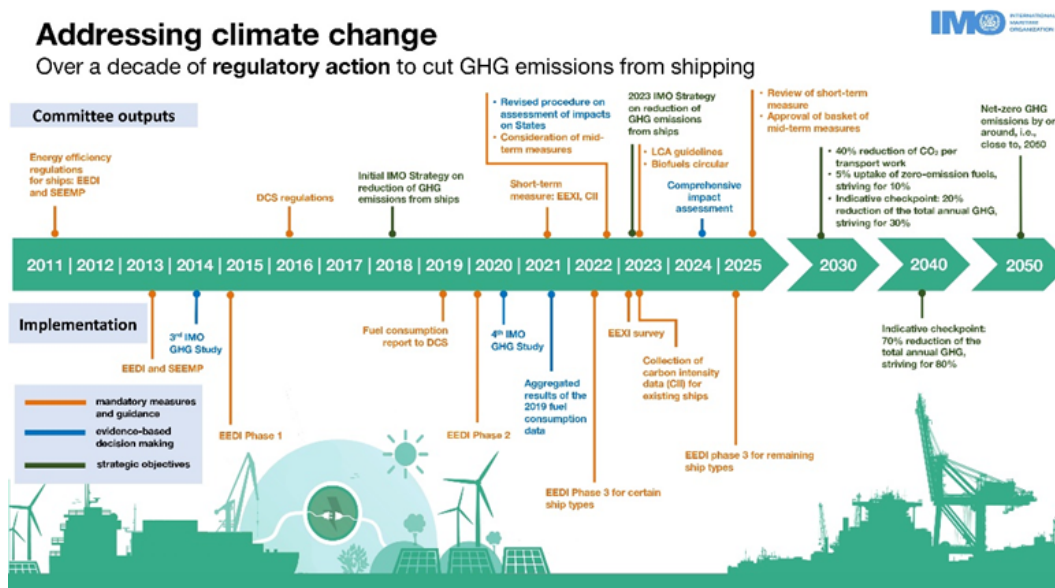


Figura 1.3: Metas IMO – 2011 à 2050 [8]

## 2 Objetivos

Analisando o cenário atual de transição energética no setor de transportes, em especial no setor marítimo, é imprescindível mapear os futuros desafios e oportunidades que o uso dos biocombustíveis irá gerar em um setor ainda inexplorado para seu consumo. O seguinte estudo visa avaliar o impacto da utilização de misturas ternárias de diesel marítimo com biodiesel e etanol em motores marítimos. Para isso, serão realizadas simulações numéricas no software CONVERGE CFD.

Uma vez que os parâmetros geométricos, misturas, processo de injeção e modelo de combustão e turbulência forem devidamente definidos, serão obtidos dados referentes a taxa de liberação de calor, pressão e temperatura máxima, além de emissões de  $NO_x$  e fuligem. O intuito da pesquisa é inicialmente trabalhar com duas misturas bases: Diesel marítimo para o grupo de misturas binárias de diesel marítimo e etanol, e o B20 (diesel marítimo + biodiesel 20%) para as misturas ternárias contendo diesel marítimo, biodiesel e etanol. Após todas as misturas serem devidamente simuladas, serão realizadas análises dos dados obtidos dos parâmetros citados anteriormente, avaliando o desempenho que cada mistura teve em seu grupo. Posteriormente será realizada uma análise comparativa entre outros estudos que realizaram simulações semelhantes com essas misturas.

## 3 Revisão Bibliográfica

### 3.1 Motores de Combustão Interna com ignição por compressão

De forma geral, motores de combustão interna se dividem entre motores de 2 e 4 tempos. O motor de 4 tempos tende a ser mais eficiente e menos nocivo com suas emissões quando comparado com o motor de 2 tempos, portanto é o ideal para o estudo em questão. Ele se divide em 4 fases, sendo elas: admissão, compressão, expansão e exaustão. [11]

Na fase de admissão, a válvula de admissão é aberta, permitindo que a mistura de ar combustível (Ignição por centelha) ou ar puro (Ignição por compressão) entre na câmara de combustão, o pistão, que estava no ponto morto superior (PMS), desce até o ponto morto inferior (PMI), enchendo a câmara de combustão com a mistura, até que a válvula de admissão se feche. [11]

Com o fechamento da válvula, começa a segunda fase, de compressão. O pistão se eleva novamente para a posição do ponto morto superior, comprimindo a mistura da câmara de combustão. O processo se encerra com a combustão do combustível injetado através da ignição do motor (No caso de motores de combustão interna com ignição por compressão, a injeção do combustível ocorre um pouco antes do pistão atingir o PMS). [11]

No processo de expansão, o pistão é empurrado novamente para o ponto morto inferior, devido a expansão dos gases de exaustão após a ignição no final da fase 2. [11]

Por fim, ocorre o processo de exaustão: os gases são expulsos da câmara de combustão através da abertura da válvula de exaustão. Com a saída dos gases, o pistão retorna para o ponto morto superior como estava no início do processo, finalizando o ciclo. [11]

O motor de combustão por compressão foi criado por Rudolph Diesel em 1892. Ao contrário do motor ciclo Otto, motores de combustão por compressão permitem uma razão de compressão maior, o que ocasiona uma maior eficiência. Na fase de combustão, ao invés de termos uma vela como na ignição por centelha, temos um injetor de combustível. Os processos de admissão, compressão, combustão e escape/exaustão são exemplificados na figura 3.1 abaixo. [12]

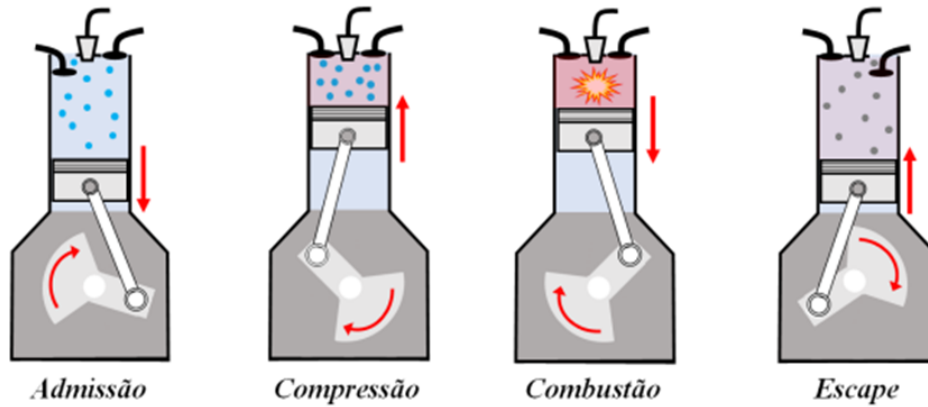


Figura 3.1: Ciclo Diesel de 4 tempos [10]

Devido à alta razão de compressão do ar puro na fase de compressão, a injeção do combustível permite a formação de um spray, seguido da vaporização e depois as condições de pressão e temperatura são tais que ocorre uma autoignição na câmara. A figura 3.2 abaixo demonstra o ciclo ideal de um motor de combustão com ignição por compressão, também chamado de ciclo Diesel, temos a variação da pressão e do volume ao longo das fases. [11]

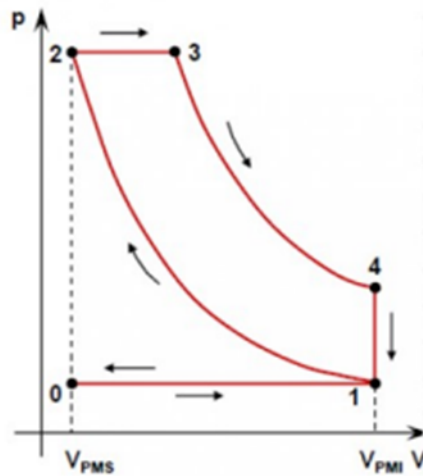


Figura 3.2: Ciclo Diesel ideal [10]

Os processos  $0 \rightarrow 1$  e  $1 \rightarrow 2$  são semelhantes ao processo de admissão e compressão do ciclo Otto, com diferença que se tem ar puro ao invés de ar combustível, gerando uma taxa de compressão maior. [11]

O processo  $2 \rightarrow 3$  é onde ocorre a combustão. O processo  $3 \rightarrow 4$  é a expansão isentrópica dos gases até o ponto PMI. Em  $4 \rightarrow 1$ , temos a abertura da válvula de escape, que finaliza o ciclo com o processo  $1 \rightarrow 0$ , com a exaustão isobárica dos gases para fora da câmara de combustão. [11]

Ao contrário do motor SI, a injeção direta do combustível já vaporizado na câmara de combustão elimina a necessidade de alta volatilidade no combustível, suprimindo o cenário de auto-detonção. Dessa forma, pode-se utilizar uma razão de compressão maior em motores CI.

Embora a volatilidade não seja mais um fator, a viscosidade do combustível precisa ser considerada, a fim de que o processo de injeção do combustível forme um bom spray na câmara. Em sua maioria, os combustíveis são hidrocarbonetos que podem ou ser obtidos do petróleo ou através de óleos vegetais ou de animais. [11]

## 3.2 Modelagem da Combustão

### 3.2.1 Equilíbrio termodinâmico e minimização da energia livre de Gibbs

A modelagem da combustão através da entropia do sistema é um processo complexo devido a constante necessidade de calcular a composição da mistura utilizada na câmara a cada variação da temperatura e pressão e da estequiometria da reação. Para isso, o método da minimização da energia livre de Gibbs é uma alternativa para a substituição da entropia como principal propriedade termodinâmica. [13]

Em uma mistura de gás de combustão, a energia livre de Gibbs pode ser representada como:

$$G = \sum_p^P N_i [\bar{g}_T^o + R_u T \ln(P_i/P^o)] \quad (3-1)$$

Onde:

- $G$  é a energia livre de Gibbs da mistura
- $\bar{g}_T^o$  em J/mol, é a energia molar de Gibbs da espécie  $i$  na mistura.
- $N_i$  em mol, é quantidade de matéria da espécie  $i$ , na mistura.
- $P_i$  é a pressão parcial da espécie  $i$  na mistura.
- $P^o$  é a pressão inicial da mistura
- $T$  é a temperatura da mistura
- $R_u$  é a constante universal dos gases

O processo de minimização pode ser feito a partir dos multiplicadores de Lagrange, para cada espécie  $i$  da mistura, com formulação química  $C_x H_y$ , a minimização pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\bar{g}_{i,T}^o}{R_u T} + \ln \frac{N_i}{N_o} + \ln \frac{P_i}{P^o} + 1 - \sigma C - \sigma H = 0 \quad (3-2)$$

Onde:

- $\sigma C$  é o multiplicador de lagrange para o carbono
- $\sigma H$  é o multiplicador de lagrange para o hidrogênio
- $N_o$ , em mol, é a quantidade de matéria inicial da mistura.

### 3.2.2 Modelo de Wiebe

O método da modelagem da combustão pode ser feito a partir a função Wiebe simples, sendo essa um modelo matemático amplamente utilizado para modelagem em motores de combustão interna. Ela foi desenvolvida em 1967, e descreve a fração da massa do produto queimada, juntamente com seu perfil de queima. [14]

O gráfico de sua função tem como principal característica um formato de "S", crescendo a partir do zero, o que indica o começo da combustão, evoluindo até o seu término. Dentre os modelos utilizados para a modelagem da combustão, esse pode ser considerado simples, quando comparado com modelos como o da "frente de chama turbulenta", que funciona a partir da correlação entre velocidade turbulenta de queima e intensidade do fluxo turbulento . [14].

A função Wiebe é definida da seguinte forma:

$$x_b(\theta) = 1 - \exp\left(-a\left(\frac{\theta - \theta_0}{\Delta\theta}\right)^{m+1}\right) \quad (3-3)$$

Onde:

- $x_b(\theta)$  = fração da massa queimada em função de  $\theta$
- $\theta$  = Angulo do virabrequim
- $a$  = Parâmetro de eficiência da função Wiebe
- $m$  = Fator de forma da função Wiebe
- $\Delta\theta$  = Duração da combustão
- $\theta_0$  = Início da combustão

Os parâmetros "a" e "m" podem ser alterados de acordo com a necessidade para ajustar a curva com os parâmetros do motor, da carga, da rotação e do combustível utilizado na queima. O coeficiente "a" controla a velocidade da queima. Já o coeficiente "m", permite o controle da propagação da chama ao longo da queima. [14]

### 3.2.3 Modelo de Wiebe de duas zonas

A função Wiebe de duas zonas é uma variação da função Wiebe original. Essa, por sua vez, permite a realização de uma modelagem mais precisa da combustão. Sua principal diferença é que a câmara de combustão é dividida em duas partes, a zona queimada, e a zona não queimada. De forma aplicável, ela leva em conta a transferência de calor e massa entre as duas zonas. [15]

Para a fração de massa queimada, temos a seguinte equação:

$$m = m_u + m_b \quad (3-4)$$

Onde:

- m = massa do cilindro
- b = índice para a zona queimada
- u = índice para a zona não queimada
- $m_b$  = massa queimada
- $m_u$  = massa não queimada

$$V = V_u + V_b \quad (3-5)$$

Onde:

- V = volume do cilindro
- $V_b$  = volume da zona queimada
- $V_u$  = volume da zona não queimada

O somatório da variação de volumes precisa ser igual à variação do volume do cilindro:

$$\frac{dV_u}{d\theta} + \frac{dV_b}{d\theta} = \frac{dV}{d\theta} \quad (3-6)$$

$$\frac{dm_b u_b}{d\theta} = -p_c \frac{dV_b}{d\theta} + \frac{dQ_F}{d\theta} - \sum \frac{dQ_{W_b}}{d\theta} + h_u \frac{dm_b}{d\theta} - \frac{h_{BB,b}}{d\theta} \quad (3-7)$$

Para a fração de massa não queimada, temos:

$$\frac{dm_u u_u}{d\theta} = -p_c \frac{dV_u}{d\theta} - \sum \frac{dQ_{W_u}}{d\theta} + h_u \frac{dm_u}{d\theta} - \frac{h_{BB,u}}{d\theta} \quad (3-8)$$

Onde:

- $Q_W$  = Perda de calor na parede do cilindro
- $Q_F$  = Energia do combustível
- u = energia interna específica
- $h_{BB}$  = entalpia devido ao blow-by



### 3.2.4 Cinética das reações no CFD

#### Equações do volume de controle

É possível descrever o escoamento de um fluido através dos processos de conservação de massa, momento e energia. [16]

A equação da conservação de massa definida no Converte CFD pode ser definida como a soma da variação da densidade ao longo do tempo com a vazão do produto saindo do volume de controle:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = S \quad (3-9)$$

Onde:

- $\rho$  é a densidade do fluido
- $u$  é a velocidade
- $S$  é o termo fonte, representando as interações com fase discreta (spray)
- $x_i$  é a coordenada espacial da espécie  $i$

A equação da conservação de momento é interpretada como a taxa de variação do momento de uma partícula no fluido é igual à soma das forças exercidas sobre ela:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + S_i \quad (3-10)$$

Onde  $P$  é a pressão, e  $\sigma_{ij}$  é o tensor de tensão viscosa definido como:

$$\sigma_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left( \mu' - \frac{2}{3} \mu \right) \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (3-11)$$

Sendo:

- $\mu'$  é a viscosidade dilatacional
- $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker

A equação de conservação de energia é definida a partir da primeira lei da termodinâmica da seguinte forma:

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial \rho e u_j}{\partial x_j} = -P \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( K \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho \sum_i D_i h_i \frac{\partial \Upsilon_i}{\partial x_j} \right) + S \quad (3-12)$$

Define-se:

- $\Upsilon_i$  é a fração mássica da espécie  $i$
- $D_i$  é o coeficiente de difusão mássica da espécie  $i$

- $P$  é a pressão
- $e$  é a energia interna específica
- $K$  é a condutividade térmica
- $h_i$  é a entalpia específica da espécie  $i$

O CFD também utiliza a equação de transporte de espécies para a definição da fração mássica das espécies no domínio:

$$\Upsilon_i = \frac{M_i}{M_{tot}} = \frac{\rho_i}{\rho_{tot}} \quad (3-13)$$

Onde:

- $M_i$  é a massa da espécie  $i$
- $M_{tot}$  é a massa total na célula
- $\rho_i$  é a densidade da espécie  $i$
- $\rho_{tot}$  é a densidade na célula

A equação de transporte das espécies pode ou ser resolvida sozinha ou junto de outras equações de transporte. Entretanto, se a equação de conservação do momento não tiver sido resolvida, a convecção não será considerada na equação de transporte das espécies, de forma que a equação de conservação das espécies só irá conter os termos de difusão.

A equação de conservação das espécies no Converge CFD é definida da seguinte forma:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D_i \frac{\partial \Upsilon}{\partial x_j} \right) + S_i \quad (3-14)$$

$$\rho_i = \Upsilon_i \rho \quad (3-15)$$

Onde:

- $\rho_i$  é a densidade da espécie  $i$
- $Upsilon_i$  é a fração mássica da espécie  $i$
- $D_i$  é o coeficiente de difusão mássica da espécie  $i$
- $S_i$  é o termo fonte da espécie  $i$

O cálculo do coeficiente de difusão é feito de forma independente da espécie, definido da seguinte forma:

$$D_i = D = \frac{v_i}{Sc} \quad (3-16)$$

Onde:

- $Sc$  é o número de Schmidt.

- $v_i$  é a viscosidade cinemática da espécie  $i$

$$v_i = \frac{\mu_i}{\rho_i} \quad (3-17)$$

Sendo:

- $\mu_i$  é a viscosidade dinâmica da espécie  $i$
- $\rho_i$  é a densidade da espécie  $i$

Para modelos turbulentos, o coeficiente de difusão mássica turbulento é definido como:

$$D_t = \frac{v_t}{Sc_t} \quad (3-18)$$

Onde  $Sc_t$  é o número de Schmidt turbulento.

### Modelagem da turbulência

Para a resolução da modelagem de turbulência, pode-se utilizar o modelo turbulência de Navier-Stokes por Médias de Reynolds, RANS, (*Reynolds-averaged Navier–Stokes*). Nesse método, as variáveis de fluxo como a velocidade são decompostas como o resultado da soma entre um valor médio e um valor flutuante:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (3-19)$$

Onde:

- $u_i$  é velocidade instantânea a ser decomposta
- $\bar{u}_i$  é velocidade média resultante da decomposição
- $u'_i$  é o termo flutuante da velocidade

Substituindo a equação (2-17) nas equações de Navier-Stokes, é possível derivar as equações de transporte de RANS e calcular sua média. Essas equações comprimidas para o transporte de massa e momento podem ser expressas como:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (3-20)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\tau_{ij}) \quad (3-21)$$

A média de Favre,  $\tilde{u}_i$  é definida como:

$$\tilde{u}_i = \frac{\overline{\rho u_i}}{\bar{\rho}} \quad (3-22)$$

A tensão de Reynolds,  $\tau_{ij}$ , representa os efeitos da turbulência. Essa tensão é definida como:

$$\tau_{ij} = \widetilde{u'_i u'_j} \quad (3-23)$$

### 3.3 Distribuição dos combustíveis no motor

Atualmente, os combustíveis utilizados em navios podem ser classificados a partir de sua origem (fóssil ou renovável) e seu modo de produção. Os combustíveis que são produzidos com resíduos pesados da destilação do petróleo são denominados óleos combustíveis marítimos (OCM), ou óleos bunkers. Já os combustíveis produzidos a partir de concentrações menores de resíduos da destilação (ou seja, são compostos mais leves obtidos na destilação do petróleo) são conhecidos como óleo diesel marítimo (ODM). [17]

Com o intuito de controlar as concentrações de enxofre nos combustíveis marítimos, a IMO determinou que os combustíveis não podem emitir mais do que 0,50%*m/m* (massa/massa) de enxofre fora de áreas de controle designadas. A utilização de biocombustíveis como o etanol ou o biodiesel também são alternativas para a descarbonização do transporte marítimo. [9]

#### 3.3.1 Óleo Diesel Marítimo

O óleo diesel é o principal combustível para motores de ignição por compressão ou ciclo diesel, sendo utilizado principalmente em veículos de grande porte como caminhões, ônibus ou embarcações. Sua composição é de principalmente hidrocarbonetos, com cadeias de 8 a 16 carbonos, contendo também quantidades de enxofre, nitrogênio e oxigênio. [18]

No cenário marítimo há o óleo diesel marítimo (ODM) e o óleo combustível marítimo (OCM). O ODM, por sua vez, possui diferenças intrínsecas com relação à sua versão automobilística. Ele deve atender um índice de cetano mínimo de 35 ou 40, que está relacionado a qualidade da combustão do composto. Além de requisitos estabilidade à oxidação e aparência. A Resolução ANP n°52 de 2010 e a norma ISO 8217 especificam para os destilados 0,5% de teor de enxofre (S). [17]

O OCM pode ser categorizado a partir de sua viscosidade máxima a 50<sup>o</sup>, de tal forma que temos as seguintes variações: OCM 120 (viscosidade máxima de 120 *mm*<sup>3</sup>/*s*) OCM 180 (viscosidade máxima de 180 *mm*<sup>3</sup>/*s*) e OCM 380 (viscosidade máxima de 380 *mm*<sup>3</sup>/*s*).

Tabela 3.1: Tabela com os parâmetros do Óleo Combustível Marítimo [13]

PROPRIEDADE	UNIDADE	TIPO		
		OCM 120	OCM 180	OCM 380
Viscosidade a 50 °C, máx	$mm^3/s$	120	180	380
Resíduo de Carbono, máx	% massa	14	15	18
Enxofre Total, máx	% massa		0,5	
Sulfeto de hidrogênio	mg/kg		2	
Número de acidez, máx	mg KOH/g		2,5	
Massa Especifica a 20 °C, máx	$kg/m^3$	981,8		987,8
ICAC, máx. (4), (5)	-		860	870
Cinzas, máx	% massa		0,07	0,1
Ponto de Fulgor, min	°C		60	
Ponto de Fluidez, máx	°C		30	
Água, máx	% vol		0,5	
Sedimentos (com envelhecimento), máx	% massa		0,1	
Alumínio mais Silício, máx	mg/kg	40	50	60
Vanádio, máx	mg/kg		150	350
Sódio, máx	mg/kg	100	50	100
Cálcio, máx	mg/kg		30	
Fósforo, máx	mg/kg		15	
Zinco, máx	mg/kg			

Tabela 3.2: Tabela com os parâmetros do Óleo Diesel Marítimo [13]

PROPRIEDADE	UNIDADE	TIPO	
		DMA	DMB
Aspecto	-	Límpido e isento de impurezas	Anotar
Enxofre Total, máx	% massa	0,5	
Sulfeto de hidrogênio	mg/kg	2	
Número de acidez, máx	mg KOH/g	0,5	
Massa Especifica a 20 °C, máx	kg/m <sup>3</sup>	876,8	896,8
Viscosidade a 40 °C, máx	mm <sup>3</sup> /s	2,0 - 6,0	2,0 - 11,0
Cinzas, máx	% massa	0,01	
Ponto de Fulgor, min	°C	60	
Ponto de Fluidiez, máx inverno	°C	-6	0
Tipo verão	°C	0	6
Água, máx	% vol	-	0,3
Sedimentos (com envelhecimento), máx	% massa	-	0,1
Resíduo de Carbono no resíduo dos 10% finais de destilação, máx	% massa	0,3	-
Resíduo de Carbono, máx	-	-	0,3
Estabilidade á oxidação, máx	mg/100ml	2,5	
Lubrificação, máx	μ m	520	-

### 3.3.2 Biodiesel

O uso do biodiesel no setor de transportes só era limitado ao setor rodoviário. Entretanto, já há testes envolvendo o uso do biodiesel em navios. A Petrobras vem realizando testes envolvendo biodiesel proveniente de gordura animal em seu combustível marítimo (bunker). O volume total de biodiesel na mistura era equivalente a 24%, e ofereceu uma redução das emissões em 19%, quando comparado ao bunker 100% mineral.[19] Outra iniciativa recente envolve o uso de biodiesel B100 (100% de biodiesel na mistura) em navios foi a liberação para uso experimental em operação fluvial pela Hermosa Navegação, sob autorização da ANP. [20]

A produção do biodiesel é realizada a partir de óleos residuais, gorduras animais ou também da extração do óleo de proteínas vegetais (oleaginosas) como milho ou soja. O processo químico responsável por sua produção é a transesterificação. Os triglicerídeos presentes nos resíduos animais ou vegetais

mencionados anteriormente reagem com um álcool primário, metanol ou etanol. Dessa reação temos o éster, que após ser purificado para atender requisitos de qualidade pode ser comercializado como biodiesel. [21]

É possível misturar o diesel tradicional, derivado do petróleo, com o biodiesel sem realizar modificações nos motores. Essa mistura aumenta a lubrificação, devido as características físico-químicas do biodiesel, além de aumentar a vida útil do motor. A redução das emissões é outro ponto a ser destacado nas misturas de diesel com biodiesel: quanto maior a concentração de biodiesel na mistura, menor são as emissões de  $CO_2$ . Em contrapartida, o  $NO_x$  tende a aumentar com o aumento da concentração.[22]

No cenário do Brasil, todo diesel automotivo possui um teor de biodiesel. Hoje, o teor de biodiesel presente é de 14%, com estimativa de chegar até 15% até 2025. O teor de biodiesel presente em uma mistura de diesel é adotado pela nomenclatura “BX”, onde o X indica o teor de biodiesel na mistura, em %.[21] No cenário marítimo ainda não há utilização de biodiesel no óleo diesel marítimo, indicando um potencial ainda não explorado dessa mistura no impacto ambiental dos transportes marítimos.

Segundo DA ROCHA (2018), a utilização de biodiesel pode apresentar tanto vantagens quanto desvantagens quando comparado ao diesel tradicional. [23] Dentre as vantagens do biodiesel em comparação ao diesel fóssil, podemos listar os seguintes itens:

- Baixa toxicidade, devido a menor emissão de monóxidos de carbono e particulados no meio ambiente
- Degradação mais rápida, reduzindo o impacto ambiental do descarte
- Sem emissões de dióxido de enxofre
- Ponto de fulgor  $>100^{\circ}C$ , reduzindo os riscos quanto à sua flamabilidade
- Miscível em toda proporção no diesel
- Alto poder lubrificante

Para as desvantagens, temos os seguintes pontos:

- Incapaz de suprir a demanda de diesel atual em caso de substituição 100% de diesel para biodiesel
- Menor poder calorífico, ocasionando um consumo maior de combustível
- Maiores emissões de óxidos de nitrogênio

- Propriedades a frio inferior ao óleo diesel
- Menos estabilidade à oxidação, dificultando seu armazenamento a longo prazo

Tabela 3.3: Tabela com os parâmetros do biodiesel [12]

PROPRIEDADE	BIODIESEL (B100)
Peso molecular (g/mol)	292,6
Densidade à 20 °C (kg/m <sup>3</sup> )	887
Temperatura de ebulição (°C)	330
Viscosidade à 20 °C (cSt)	8,06
Ponto de Fulgor	140
Autoignição (°C)	
Número de Cetano	55 - 56
Razão de Ar/Combustível	12,6
Poder calorífico inferior (MJ/kg)	38,8
Calor de vaporização (kJ/kg)	350
Concentração de carbono (%wt)	76,9
Concentração de hidrogênio (%wt)	12,4
Concentração de oxigênio (%wt)	10,7
Concentração de água (%wt)	300
Temperatura da flama (°C)	

### 3.3.3 Etanol

O etanol, por sua vez, é proveniente de origem vegetal, sendo produzido a partir de cana de açúcar ou milho. O etanol possui duas formas: etanol anidro, utilizado para formação da gasolina C e como etanol hidratado, comercializado em todo o país como um combustível acabado. [24]

O Brasil é o segundo maior produtor de etanol, produzindo, em 2021, um total de 28,391 bilhões de litros ficando atrás somente dos EUA, que produziu 56,781 bilhões de litros.[25]

Embora já seja amplamente utilizado no setor rodoviário, o uso do etanol no setor marítimo ainda é inexplorado. A Raízen, maior produtora de etanol global, iniciou uma cooperação de pesquisa junto com a Wartsila, produtora de motores marítimos com a intenção de realizar pesquisas sobre o uso de etanol como combustível em navios em 2023. [26]

O etanol é utilizado principalmente em motores ciclo Otto, substituindo a gasolina convencional, testes já foram realizados com misturas de Diesel e



Etanol, mas foram concluídos que é necessário co-solventes para aumentar a miscibilidade entre o diesel e o etanol. [27] Avaliando o desempenho dessa mistura, misturas de diesel, derivado do petróleo, com o etanol contribuem para a redução das emissões de  $NO_x$ . Entretanto, em determinadas condições de operações, o acréscimo de etanol na mistura pode resultar em um aumento da emissão de fuligem, devido à redução da duração do processo de difusão da combustão. [15] A quantidade de etanol em uma mistura de gasolina segue um padrão semelhante ao do Diesel, adotando a nomenclatura “EX”, onde o X simboliza o teor, em porcentagem, de etanol na mistura do combustível.

Tabela 3.4: Tabela com os parâmetros do etanol [12]

PROPRIEDADE	ETANOL
Peso molecular (g/mol)	46
Densidade à 20 °C (kg/m <sup>3</sup> )	794
Temperatura de ebulição (°C)	78,4
Viscosidade à 20 °C (cSt)	1,2
Ponto de Fulgor	13 - 14
Autoignição (°C)	365 - 425
Número de Cetano	5 - 8
Razão de Ar/Combustível	9
Poder calorífico inferior (MJ/kg)	26,8
Calor de vaporização (kJ/kg)	1110
Concentração de carbono (%wt)	52,2
Concentração de hidrogênio (%wt)	13,1
Concentração de oxigênio (%wt)	34,7
Concentração de água (%wt)	-
Temperatura da flama (°C)	2010

### 3.3.4 Misturas binárias e ternárias

Um breve estudo sobre o desempenho da combustão de misturas outras misturas envolvendo biocombustível será realizado a fim de validar a simulação no Converge. Embora o gama de material disponível envolvendo aplicações de misturas ternárias no setor automotivo seja vasta [28], poucos são os estudos aplicados ao setor marítimo, para esse trabalho, somente 2 estudos foram analisados.

O primeiro estudo foi realizado por Adrian et al. (2022), onde foi documentado diversos resultados de simulações numéricas da combustão do diesel marítimo, biodiesel e etanol. Para isso, foi utilizado o software AVLBOOST, que realiza a simulação numérica a partir da função Wiebe de duas Zonas.

Adrian et al. (2022) realizou diversas simulações em dois tipos de motores, cuja diferença se baseava em sua velocidade: 700 rpm e 1100 rpm. Após a modelagem dos motores e sua calibração utilizando uma simulação contendo 100% de diesel convencional, foram realizadas simulações contendo diesel com uma determinada concentração de etanol, variando entre 5%, 15% e 30%. Por fim, novas simulações foram realizadas mas a mistura base foi substituída de diesel convencional para uma contendo 20% de biodiesel, posteriormente variando a concentração de etanol na mistura como nas primeiras simulações. [15]

Os resultados obtidos com relação ao desempenho do motor envolveram torque e potência, como demonstrado na figura 3.3. Adrian et al. (2022) concluiu que com o acréscimo de 5% de etanol com diesel a 700 rpm, tem-se uma queda da potência e torque do motor de até 1,84%. Ao ter 15% e 30% de etanol na mistura, tem-se uma redução de torque e potência de 5,6% e 11,3% respectivamente. [15]

Ao adicionar biodiesel na mistura (B20), foi constatado uma redução de 3,3% de torque e potência, que reduz para 5%, 8,5% e 13,76% ao acrescentar 5%, 15% e 30% de etanol no B20, respectivamente. [15]

As reduções também ocorreram ao utilizar um motor de 1100 rpm, entretanto, foi observado que o impacto na potência e torque menor do que no motor de 700 rpm. De forma geral, a adição de etanol corroborou para a perda de potência e torque no motor, a adição de biodiesel também afetou negativamente o desempenho do motor, devido ao poder calorífico inferior do biodiesel (38,8 MJ/kg) quando comparado ao diesel convencional (42,5 MJ/kg). [15]

Com relação as emissões, foram obtidos dados de fuligem e  $NO_x$  emitidos, como visto na figura 3.4. Os dados coletados indicaram que o uso do etanol no motor de 700 rpm reduz o  $NO_x$  emitido na queima, começando com uma redução de 2,55% no cenário de DE05, 9,69% em DE15, chegando até uma redução de 20,4% no DE30. Entretanto, a adição de biodiesel (B20) na mistura gera um aumento do  $NO_x$  emitido quando comparado ao diesel convencional, totalizando 26,5% de aumento, seguida por uma redução de fuligem de 20,5% também comparado ao diesel convencional. A adição de etanol ao B20 reduz o acréscimo de  $NO_x$ , 21,9% de acréscimo para o B20E05, 12,7% para o B20E15 e um aumento mínimo de 1,5% para B20E30. Entretanto o uso do etanol na mistura com biodiesel reduz o impacto da redução de fuligem originada pelo B20, com uma redução de 19,28% para o B20E05, 15,66% para o B20E15 e 12,05% para o B20E30.[15]

Por fim, a influencia do etanol tanto no diesel convencional quanto no

B20 é positiva para a redução das emissões de  $NO_x$ , mas negativa quando analisado o impacto da fuligem. Esse resultado está atrelado ao impacto do etanol na combustão, resultando em temperaturas mais baixas no interior do cilindro, dessa forma, quanto maior a concentração de etanol na mistura, menor é a temperatura no cilindro. [15]

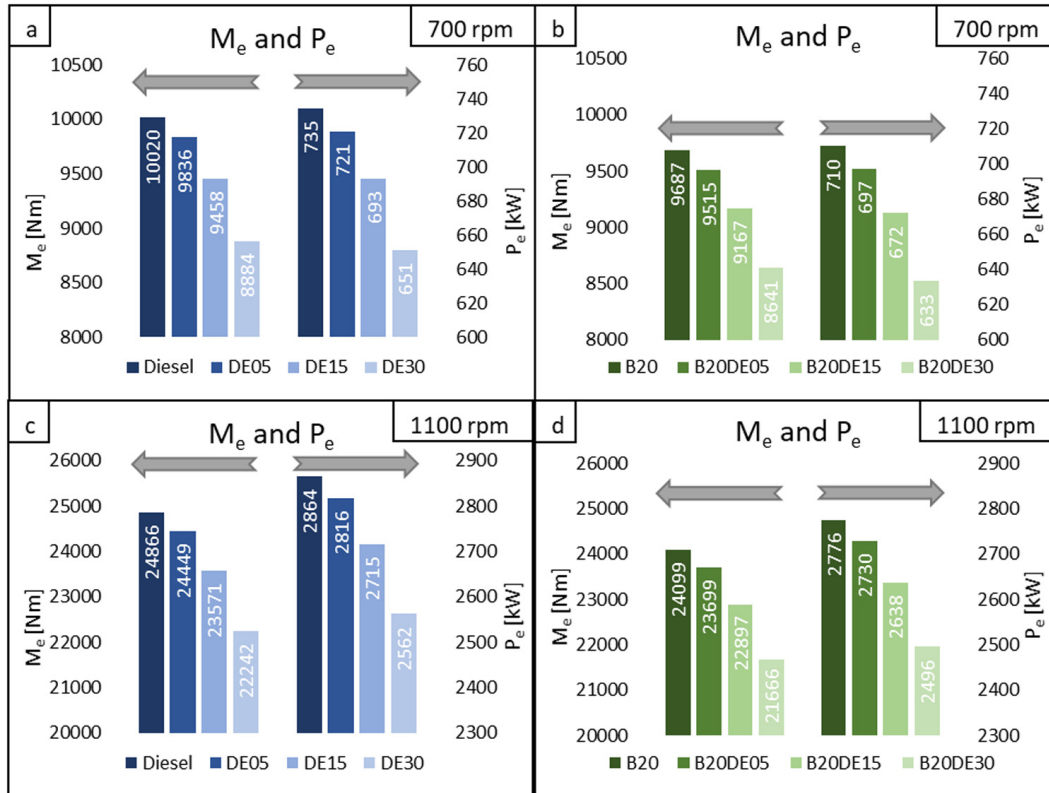


Figura 3.3: Resultados de Torque e Potência do uso dos biocombustíveis [12]

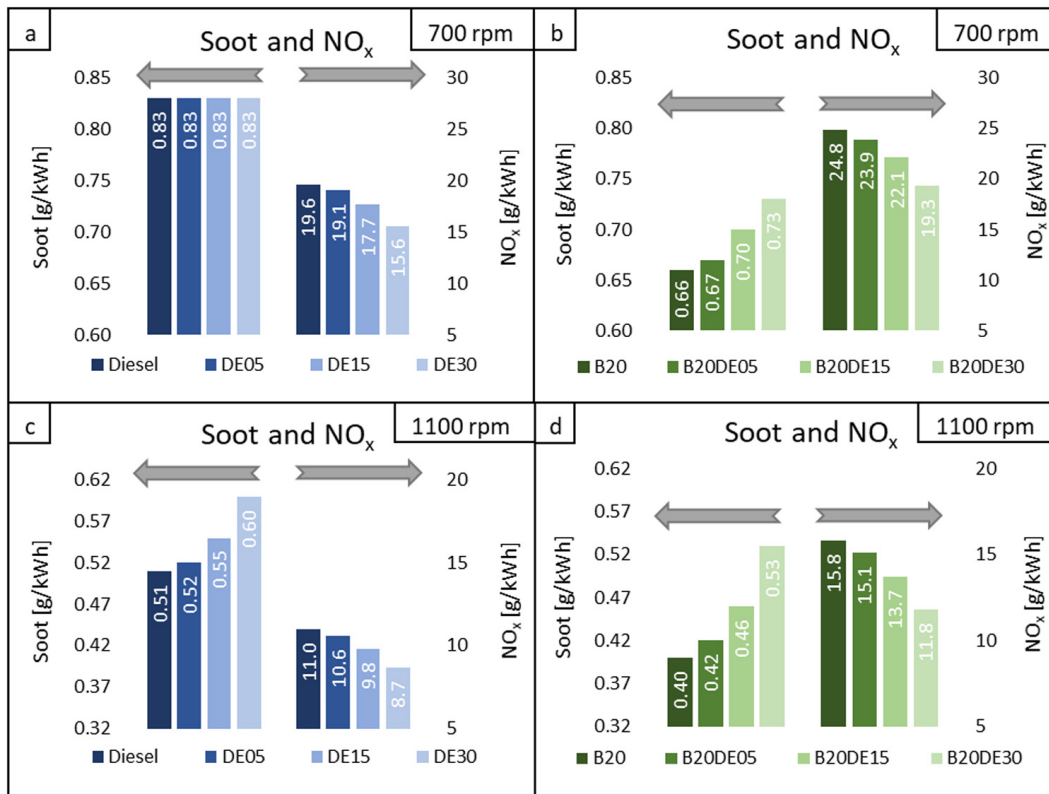


Figura 3.4: Emissões de fuligem e de  $NO_x$  [12]

Khan et al. (2023), realizou testes experimentais envolvendo misturas quartenária contendo diesel marítimo (50%), biodiesel produzido a partir de girassol (25%), óleo de girassol (5%) e álcool (20%), variando a cadeia de carbonos presente na mistura do álcool (etanol, propanol, butanol, heptanol e decanol). [29]

Os testes ocorreram em um motor com rotação de 1800 rpm, e ao fim do experimento, as misturas foram avaliadas a partir dos seguintes parâmetros: Performance do motor, eficiência térmica do freio, emissões de exaustão: CO, CO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, hidrocarbonetos não queimados e opacidade da fumaça. [29]

Com relação ao desempenho do motor, foi avaliado o Consumo Específico de Combustível e a eficiência térmica. A mistura contendo butanol apresentou o pior resultado em ambos os teste, com um consumo 24,1% maior que o diesel a 50% da carga e uma eficiência 9,01% menor no ponto de 75% da carga total. Khan atribuiu o baixo desempenho do butanol devido a maior viscosidade do álcool, causando uma formação pobre de spray na câmara, degradando a combustão. O propanol, em contrapartida, resultou em um consumo 13,8% menor que o diesel a 50% da carga, e uma eficiência 11,6% maior a 25% da carga total, o que foi atribuído à maior quantidade de oxigênio nas cadeias do propanol e sua menor viscosidade. [29]

Com relação as emissões, uso do propanol reduziu as emissões de CO<sub>2</sub>,

$NO_x$  e fuligem em 19,6%, 9,9% e 85,7% quando comparado com os dados apresentados do diesel tradicional. A mistura contendo o heptanol demonstrou o pior resultado com relação as emissões de  $CO_2$  e  $NO_x$ , como constatado nas figuras 3.5 e 3.6. Já a mistura contendo o decanol como álcool, demonstrou grande potencial em reduzir as emissões do monóxido de carbono em até 41,37%. O butanol, embora tenha apresentado um baixo desempenho na questão de performance do motor, demonstrou potencial de reduzir a taxa de hidrogênios não queimados em até 71,69%. A mistura contendo etanol, em contrapartida, foi a segunda mais poluente tanto em questão de  $NO_x$  quanto em questão  $CO_2$ , com uma concentração de  $CO_2$  aproximadamente 12,5% a mais que o diesel 100%. [29]

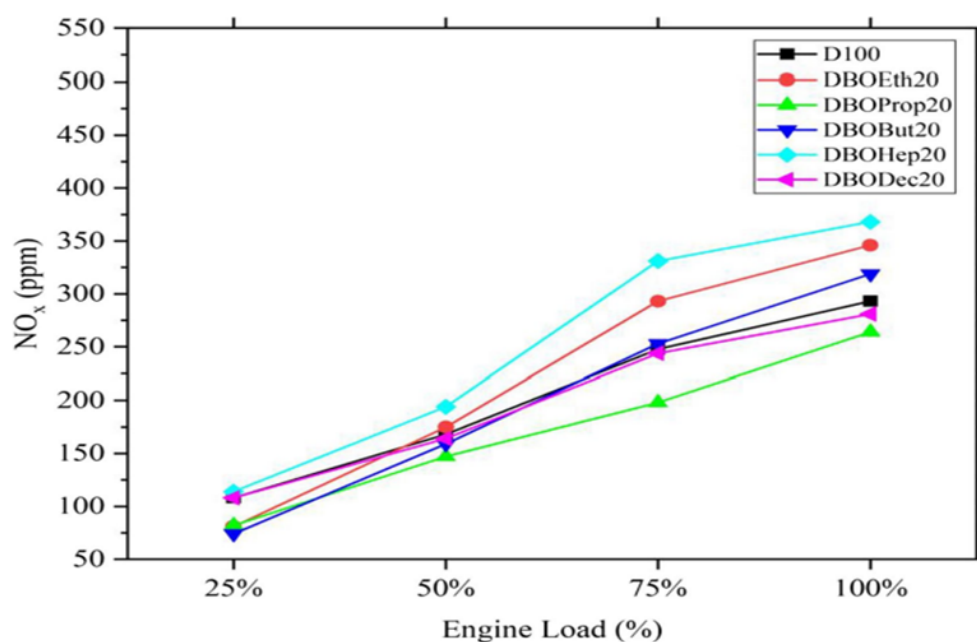


Figura 3.5: Variação das emissões de  $NO_x$  em função da carga [29]

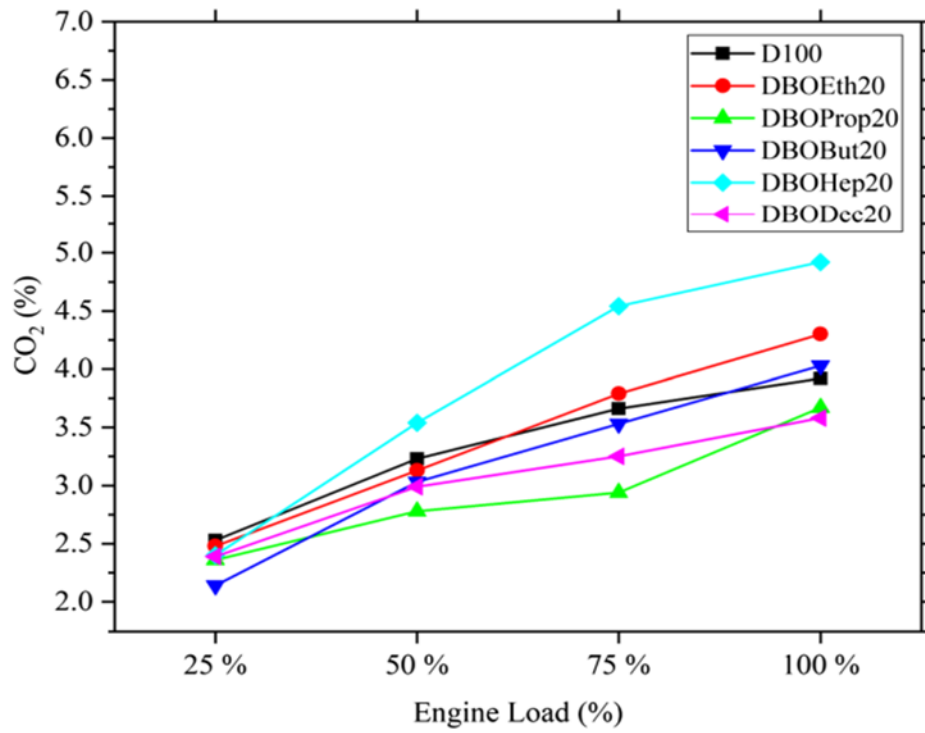


Figura 3.6: Variação das emissões de  $CO_2$  em função da carga [29]

## 4 Metodologia de simulação no Con- verge

O software converge CFD será a ferramenta utilizada para a implementação da simulação numérica da combustão das misturas ternárias utilizadas. Nele, é possível simular fluxos de fluidos tridimensionais, incompressíveis e ou compressíveis, configurar o regime do fluxo, seja ele transiente ou permanente, com todas essas configurações aplicadas à geometrias complexas com superfícies fixas ou moveis. Além disso, ele consegue simular qualquer substância, reação química e tipos de escoamento, sejam eles laminares ou turbulentos. [30]

Sua biblioteca em sua grande maioria é composta por com combustíveis derivados do petróleo como a gasolina e o diesel[30]. Mas também conta com alternativas renováveis como o etanol e biodiesel derivado do óleo vegetal ( $C_{19}H_{38}O_2$ ). Além disso, é possível adicionar diferentes combustíveis no formato “*liquid.dat*”, desde que se tenha as propriedades termodinâmicas do composto em questão.

As equações que governam o Converge são de *Navier-Stokes*, detalhadas no tópico 3.2.4, cinética das reações.

A fim de configurar corretamente o software para a simulação, será necessário realizar a definição do motor utilizado, os produtos da queima, os parâmetros temporais da simulação, condições de contorno e condições iniciais, além da definição dos modelos físicos que serão apresentados: Injeção do produto, modelo da combustão, emissões e turbulência.

### 4.0.1 Definição da geometria

O primeiro passo é a seleção da geometria em questão. É possível importar novas geometrias no programa, mas também já há uma biblioteca de geometrias já criadas e validadas no programa do qual podem ser aproveitadas. O seguinte trabalho irá utilizar de uma geometria pré definida no Converge que se adeque ao método de injeção envolvendo as misturas ternárias.

A fim de definir a melhor geometria que se adeque ao projeto, foi escolhido o modelo *ICE -> Heavy duty diesel -> Engine sector diesel SAGE multi-component transient RANS*. O modelo em questão já trabalhava com misturas ternárias em sua configuração nativa, o que auxilia no processo de adaptação do modelo para a simulação.

Tendo a geometria selecionada, é necessário realizar uma avaliação das configurações nativas do motor e ajustar seus parâmetros físicos de acordo com

as necessidades para a simulação.

Para a geometria exibida na figura 4.1 abaixo foram em questão, foi utilizada as seguintes configurações do motor:

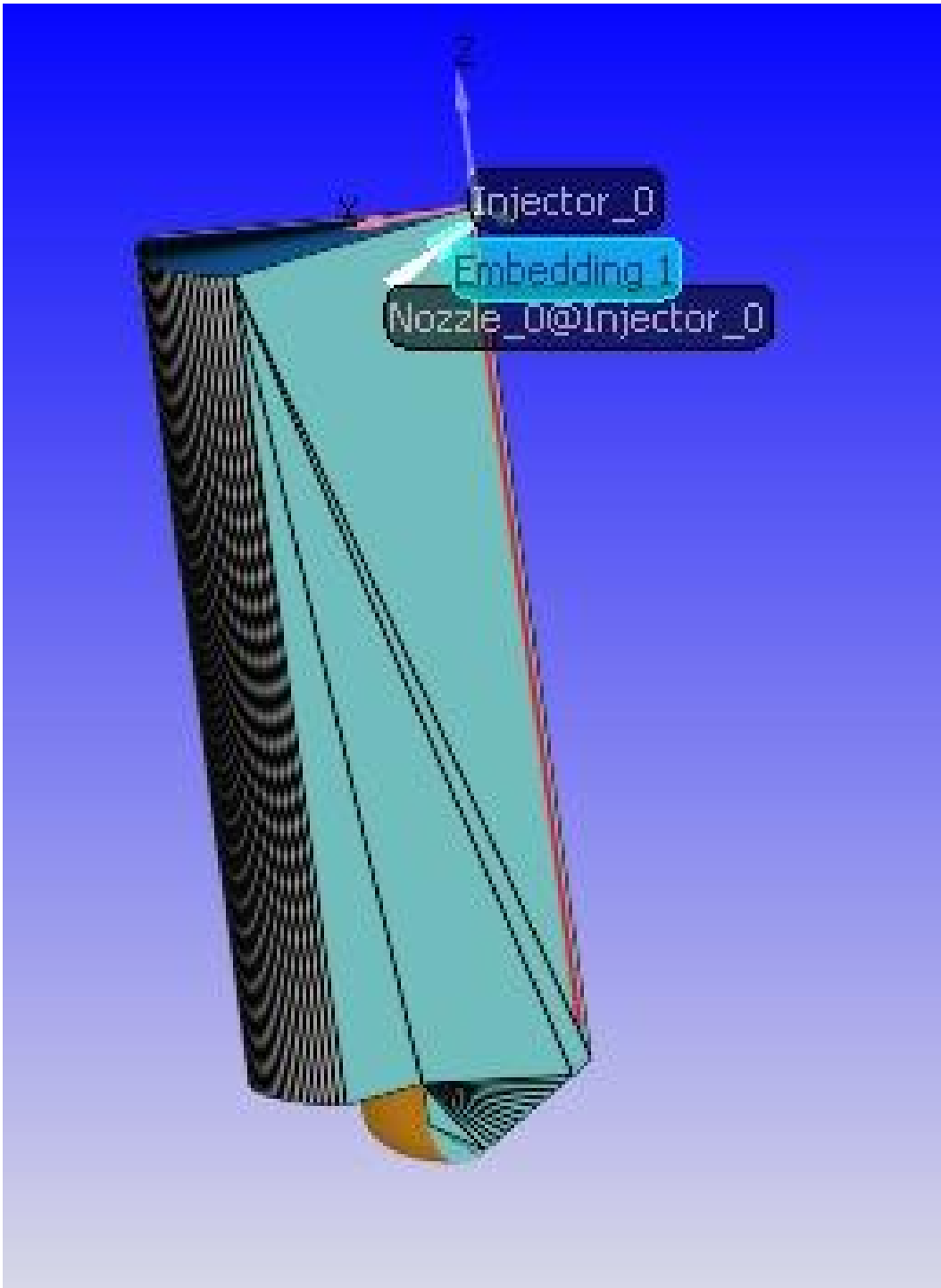


Figura 4.1: Geometria escolhida para a simulação



Tabela 4.1: Parâmetros do motor

Medida	Unidade	Valor
Diâmetro do Cilindro	m	0,13716
Curso (2 * ângulo da manivela)	m	0,1651
conexão do comprimento da haste	m	0,263
deslocamento da manivela	m	0,0
Razão de turbulência	-	9,78e-01
Perfil de turbulência	-	3,11e+00
Posição da cabeça do Cilindro (Coordenada Z)	-	0,0
Velocidade de rotação	rpm	1600,0
Razão de compressão	-	16

#### 4.0.2 Dados temporais da simulação

O processo passo envolve a configuração dos métodos de resolução numérica do converge. Com o intuito de otimizar o tempo computacional gasto nos processos de simulação, será realizado somente um ciclo para cada um dos exemplos de misturas ternárias utilizadas.

A definição de início e término do ciclo será definida a partir dos parâmetros pré definidos na geometria inicialmente, que já engloba um único ciclo iniciando em  $-147^\circ$  e finalizando em  $156^\circ$ , estimados como o tempo durante o qual ambas as válvulas de exaustão e injeção estão fechadas.

Definido o período de início e término do ciclo, inicia-se o processo de ajuste dos parâmetros temporais da simulação. Foram utilizados os dados temporais padrões da geometria:

- Passo inicial: 5e-6 segundos
- Passo máximo: 3e-5 segundos
- Passo mínimo: 5e-6 segundos

As demais configurações foram mantidas de acordo com o padrão previamente disposto pela geometria.

#### 4.0.3 Definição dos produtos

A definição dos produtos a serem inseridos na câmara de combustão foi realizada a partir da opção "*Parcel Simulation*", vista a figura 4.2. Nela, é possível adicionar compostos já definidos na biblioteca do converge em

"Predefined Liquids" ou adicionar um novo composto através da opção "Liquid Calculator".

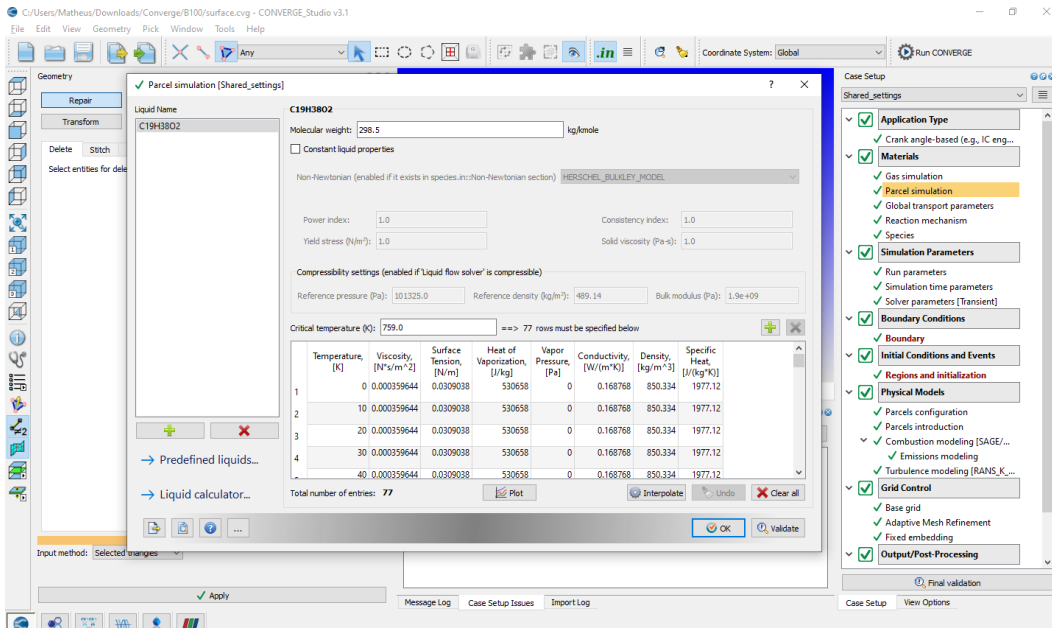


Figura 4.2: Projetos disponíveis no Converge

A definição do diesel marítimo, biodiesel e etanol é definida a partir do seguintes elementos:

- Petterson (2014), afirma que o diesel marítimo é frequentemente representado como misturas binárias de heptametilnonano (i-C<sub>16</sub>H<sub>34</sub>, altamente ramificado, C<sub>16</sub> saturado) e hexadecano normal ( $n - C_{16}H_{34}$ , cadeia reta, C<sub>16</sub> saturado). Logo, para a definição do Diesel marítimo foi escolhido o C<sub>16</sub>H<sub>34</sub>, nativo na biblioteca do Converge
- O Etanol já está incluso naturalmente na biblioteca do converge, definido como "C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH\_Ethanol\_nist"
- Para a definição do biodiesel, foi escolhido o estearato de metila C<sub>19</sub>H<sub>38</sub>O<sub>2</sub>, sendo esse produzido a partir de gordura animal, sebo bovino, também incluso na biblioteca do Converge

Para as simulações do estudo serão realizados utilizadas as seguintes misturas na tabela abaixo:

Tabela 4.2: Parâmetros das misturas

Mistura	Fração mássica de Diesel	Fração mássica de Etanol	Fração mássica de Biodiesel	PCI (MJ/kg)
DIESEL	1,00	0,00	0,00	42,5
DE05	0,95	0,05	0,00	40,9
DE15	0,85	0,15	0,00	40,2
DE30	0,70	0,30	0,00	37,2
B20	0,80	0,00	0,20	40,5
B20E05	0,75	0,05	0,20	41,1
B20E15	0,65	0,15	0,20	39,4
B20E30	0,50	0,30	0,20	36,3

#### 4.0.4 Injeção dos componentes

A seguir, encontra-se o processo de definição da metodologia de como o produto será injetado. Com cada um dos componentes definidos na seção de Definição de Produtos, começa o processo de definição da injeção desses produtos na câmara. Inicialmente, é necessário primeiro definir quais e qual tipo de mistura ternária será utilizada no processo de combustão.

Para isso, o Converge fornece a opção de "*Parcel Configuration*", demonstrado na figura 4.3. Nele é possível criar pré misturas, chamadas de "*Liq-Parcel*", a partir dos produtos escolhidos. Na opção "*Liquid Parcel Editor*", é possível configurar quais produtos irão fazer parte da mistura, bem como sua fração mássica, como visto na figura 4.4, onde é configurado a concentração dos componentes do biodiesel.

Caso seja necessário, é possível criar mais de uma mistura, dessa forma será necessário ter mais de um injetor a ser configurado posteriormente para receber a outra mistura criada. Esse método pode ser utilizado caso haja a necessidade de evitar um processo de pré mistura antes da injeção dos produtos na câmara.

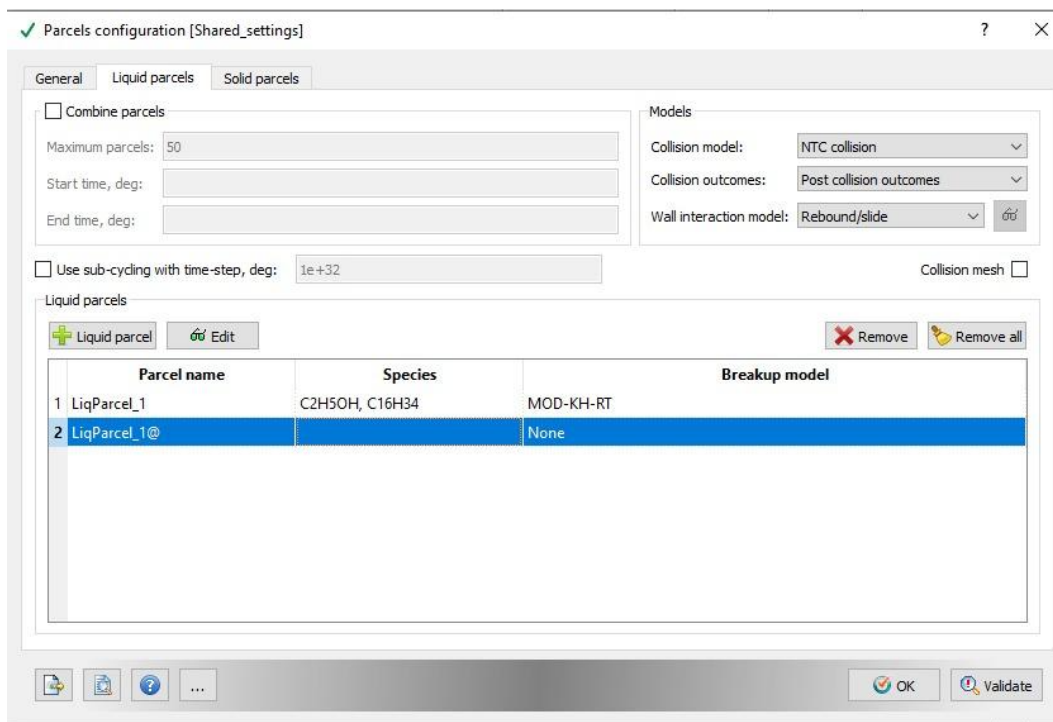


Figura 4.3: Tela de configuração de misturas ternárias

Para o trabalho em questão, somente será utilizado uma mistura por simulação, logo o processo de injeção das misturas ternárias na câmara de combustão será feito a partir de um único injetor.

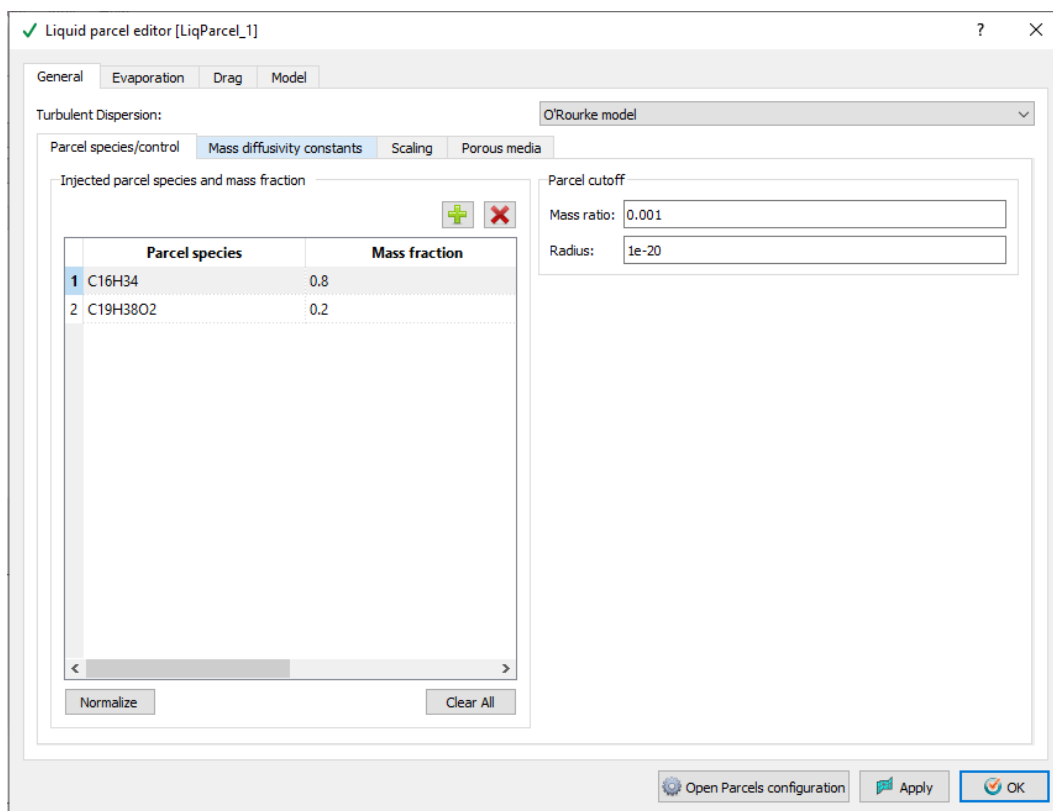


Figura 4.4: Configuração da mistura do B20

Tendo a mistura definida, será necessário realizar a criação do injetor que receberá a mistura para câmara de combustão.

Para isso é necessário definir o ponto de coordenadas onde o injetor e os parâmetros dos bocais de injeção na tela de "Injector editor", vista na figura 4.5. Caso as coordenadas não estejam devidamente sincronizadas com a câmara de combustão, há o risco da simulação alertar que há uma quantidade do produto descartada para fora do domínio da simulação.

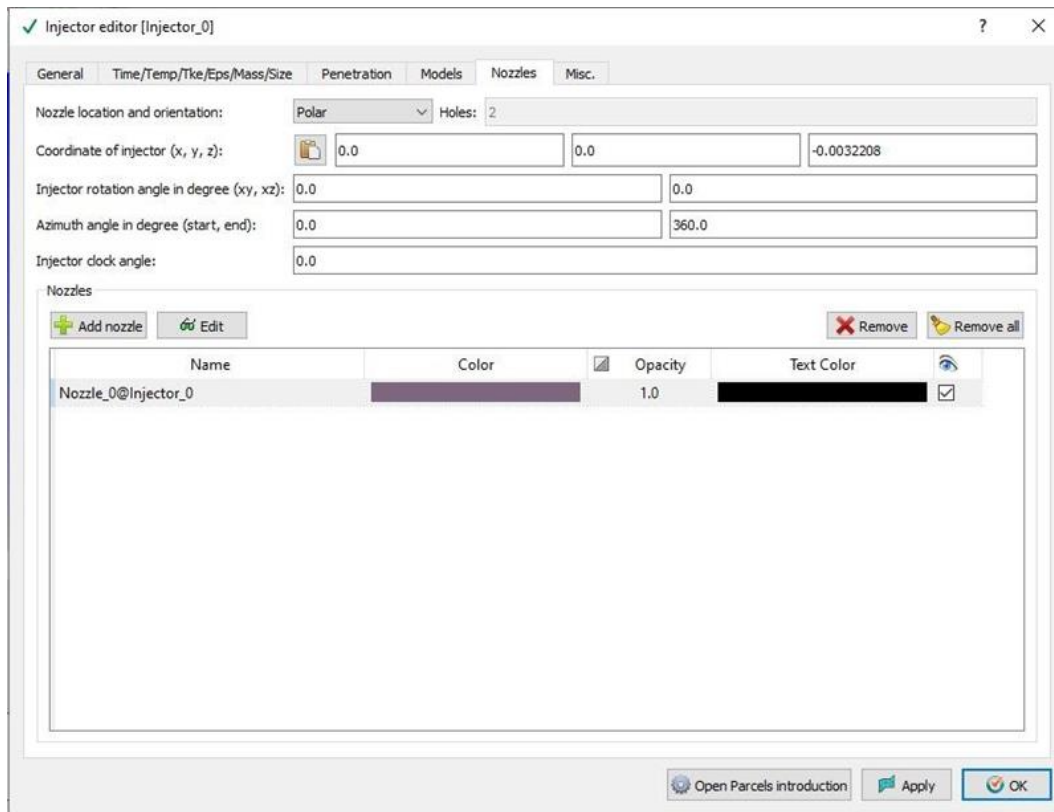


Figura 4.5: Configuração do injetor utilizado

O combustível é injetado sob o seguinte perfil de pressão de injeção:

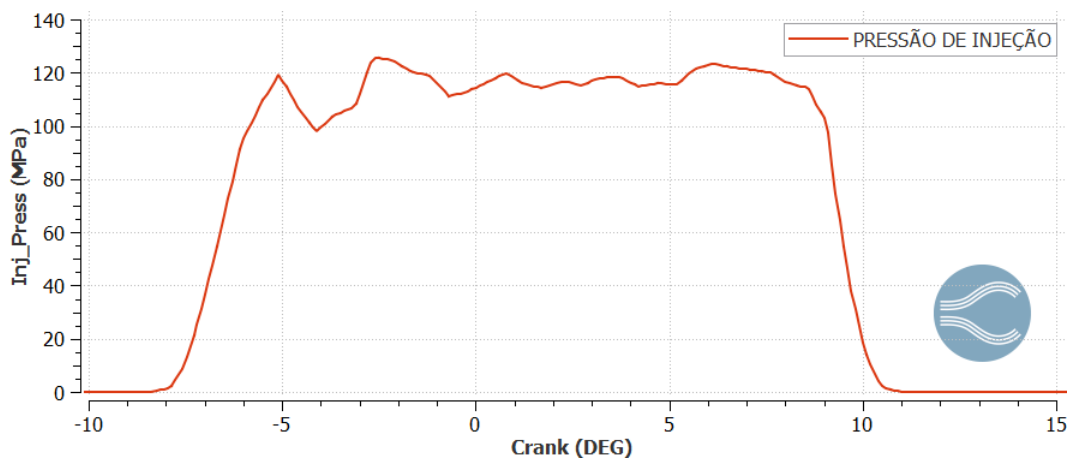


Figura 4.6: Pressão de injeção na câmara

## 4.1 Parâmetros calculados

Com a simulação finalizada será necessário obter os dados referentes ao trabalho, potência e eficiência do motor, para isso, será utilizado a ferramenta "engine calculator" que, fornecendo os resultados da simulação e os parâmetros geométricos do motor, calcula o trabalho realizado, definido no Converse como "Gross Work".

Após a obtenção do trabalho, é necessário realizar o cálculo do fluxo de calor, essa, por sua vez, pode ser calculada como o produto entre o PCI do combustível e o fluxo de massa: [11]

O fluxo de massa é definido como:

$$\dot{m} = \frac{m}{\frac{60}{N}} \quad (4-1)$$

Onde:

- $\dot{m}$  é o fluxo de massa injetada no ciclo, em kg/s
- $m$  é a massa da mistura injetada, kg
- $n$  é a velocidade do motor, em rpm

A energia injetada,  $Q$ , é definida da seguinte forma:

$$Q = m.PCI \quad (4-2)$$

Onde:

- $Q$  é a energia injetada, em J
- PCI é o poder calorífico inferior da mistura

O fluxo de calor,  $\dot{Q}$  em W, é definido como:

$$\dot{Q} = \dot{m}.PCI \quad (4-3)$$

A potência indicada pode ser definida como:

$$N_i = W_i \frac{n}{60x} z \quad (4-4)$$

Onde:

- $N_i$  é a potência indicada, em W.
- $W_i$  é o trabalho bruto, em J.
- $x$  é 1 ou 2, dependendo do motor ser respectivamente 2 tempos ou 4 tempos, para a simulação em questão,  $x = 2$ .
- $z$  é o numero de cilindros do motor, para essa simulação,  $z = 1$ .

Tendo tanto a potência indicada e o fluxo de calor, é possível calcular a eficiência  $\eta$  da seguinte forma:

$$\eta = \frac{N_i}{\dot{Q}} \quad (4-5)$$

## 5 Resultados e Discussão

Utilizando a metodologia previamente definida, cada simulação de ciclo único levou em média 24 a 30 horas para ser concluída. A primeira hora da simulação corresponde ao deslocamento do cilindro em direção ao ponto morto superior, sem injeção ou queima de produtos, o que resulta em um carregamento rápido de 0 a 50% da simulação. Durante esse período é possível avaliar periodicamente o aumento da pressão na câmara da combustão.

O tempo restante equivale a injeção e queima do produto na câmara de combustão, o que exige um esforço computacional maior da máquina, a partir desse instante será possível observar o aumento da taxa de liberação de calor do produto, juntamente com as emissões resultantes da queima como  $NO_x$  e fuligem. Para as misturas contendo diesel e etanol, foram gerados gráficos de pressão e temperatura máxima, taxa de liberação de calor e emissões de  $NO_x$  e fuligem.

Com o término das simulações, foi mapeado o tempo de cada mistura levou para completar um ciclo, o trabalho e a eficiência do motor para a mistura ternária em questão.

Tabela 5.1: Tabela de simulações

mistura	Trabalho (J)	Potência Indicada (W)	Fluxo de Calor (W)	Eficiência	Tempo de Simulação
DIESEL	3.431,03	4,57E+04	1,84E+05	24,92%	30
DE05	3.426,13	4,57E+04	1,77E+05	25,85%	23
DE15	3.429,90	4,57E+04	1,74E+05	26,33%	26
DE30	3.347,76	4,46E+04	1,61E+05	27,78%	24
B20	3.432,65	4,58E+04	1,75E+05	26,16%	29
B20E05	3.427,37	4,57E+04	1,78E+05	25,74%	30
B20E15	3.429,92	4,57E+04	1,70E+05	26,87%	24
B20E30	3.421,74	4,56E+04	1,57E+05	29,09%	30

As diferenças entre tempo de simulações observadas em cada mistura podem ser atrelados principalmente ao desempenho das máquinas utilizadas, ao todo foram utilizadas 4 máquinas para realizar as 8 simulações para a análise.

### 5.0.1 Eficiência das simulações

Na tabela 5.1, Observa-se que as eficiências resultantes da simulações demonstram valores abaixo para o padrão de um ciclo diesel real. Esses resultados podem estar atrelados às definições da condições de contorno aplicadas na simulação (condição de parede e condição de escoamento livre de massa).



As condições de contorno como pressão e temperatura de admissão e exaustão, e intensidade da turbulência foram definidas a partir do modelo pré importado da simulação. Dados como temperatura e pressão inicial da simulação foram definidos como 81,85°C e 197 KPa respectivamente, provenientes do modelo de simulação importado. Esses, por sua vez, podem não ser adequados para a simulação em questão, necessitando de futuras calibrações com dados experimentais para uma precisão maior dos resultados.

### 5.0.2 Massa injetada

O processo de injeção dessas misturas na câmara foi o mesmo para cada uma das simulações, de forma que a massa total injetada em cada simulação foi a mesma para cada mistura, como demonstrado na figura 5.1:

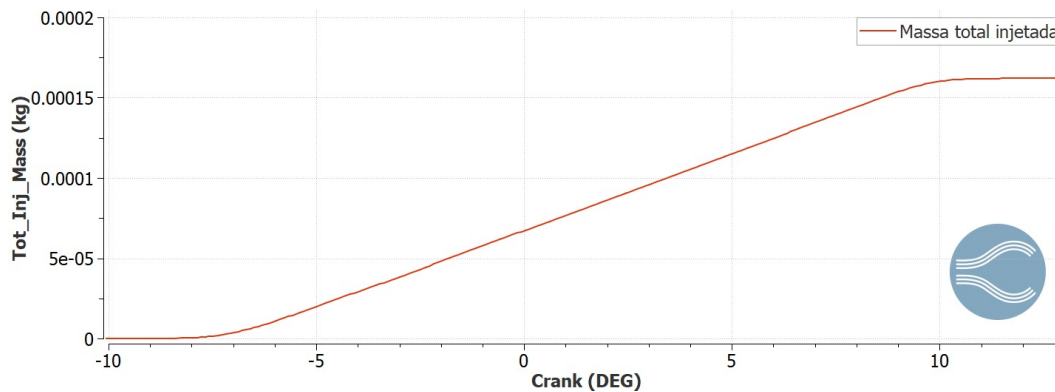


Figura 5.1: Massa injetada na câmara

O período de injeção da massa acontece a partir de  $-9^\circ$ , indo até  $10^\circ$ , onde é finalizado o processo de injeção do combustível. A massa definida para o processo de injeção foi de  $1,62 * 10^{-4} kg$  de combustível, resultando em uma vazão de  $3,32 * 10^{-3} kg/s$ .

Embora a massa total do combustível em cada uma das simulações é a mesma, o PCI de cada mistura não é igual, de tal forma que a energia total injetada para cada combustível será diferente para cada mistura, como visto na tabela 4.2.

## 5.1 Simulação Diesel + Etanol

A massa total do diesel e do etanol ao longo da combustão nas figuras 5.2 e 5.3. Observa-se que a massa de ambos os produtos começa a decair após o ângulo  $-5$  do virabrequim. Isso ocorre devido ao início da combustão, ou seja, a pressão exercida pelo cilindro se eleva de tal forma que dá início a ignição do combustível.

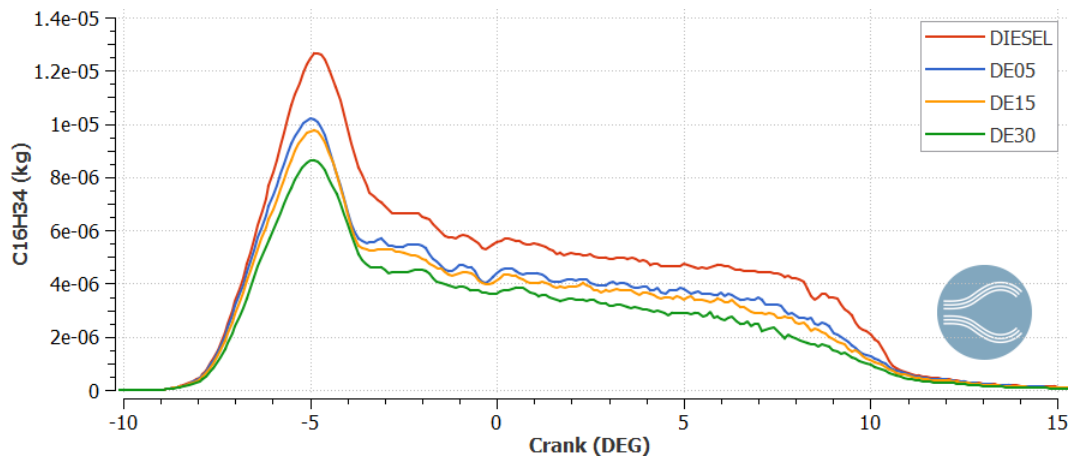


Figura 5.2: Massa de diesel injetada nas misturas ternárias de etanol

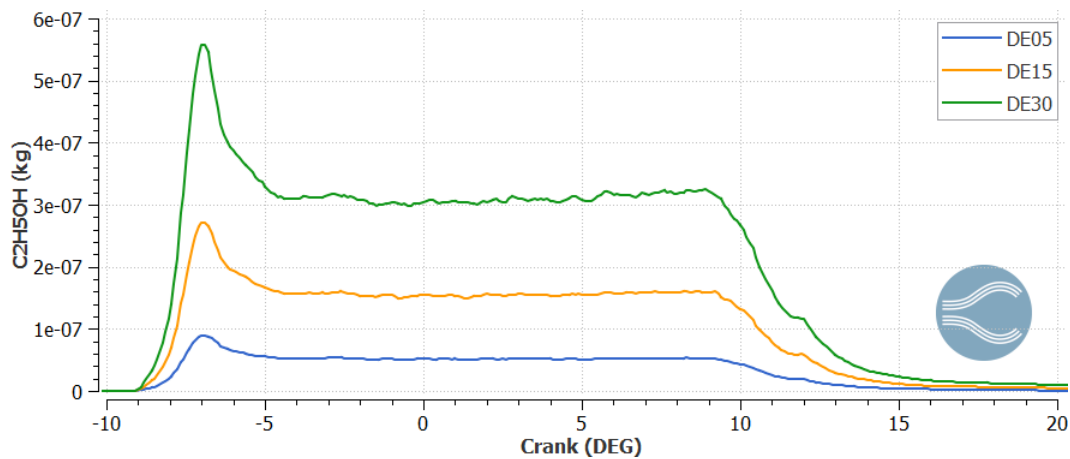


Figura 5.3: Massa de etanol injetada nas misturas ternárias de etanol

### 5.1.1 Taxa de Liberação de Calor

Com relação a taxa de liberação de calor, a mistura contendo 5% de etanol demonstrou possuir o maior potencial de calor liberado, totalizando 634,83 J/s, seguida logo após pela mistura contendo 15% de etanol, com 597,58 J/s. O Diesel e o DE30 demonstraram ter a pior performance a questão de liberação de calor, com somente 559,91 J/s e 552,76 J/s, respectivamente. O perfil de liberação da calor ao longo da simulação é observado na figura 5.4.

Tabela 5.2: Taxa de liberação de calor das misturas com etanol

Mistura	Taxa de Liberação de Calor máxima J
DIESEL	559,91
DE05	634,83
DE15	597,58
DE30	552,76

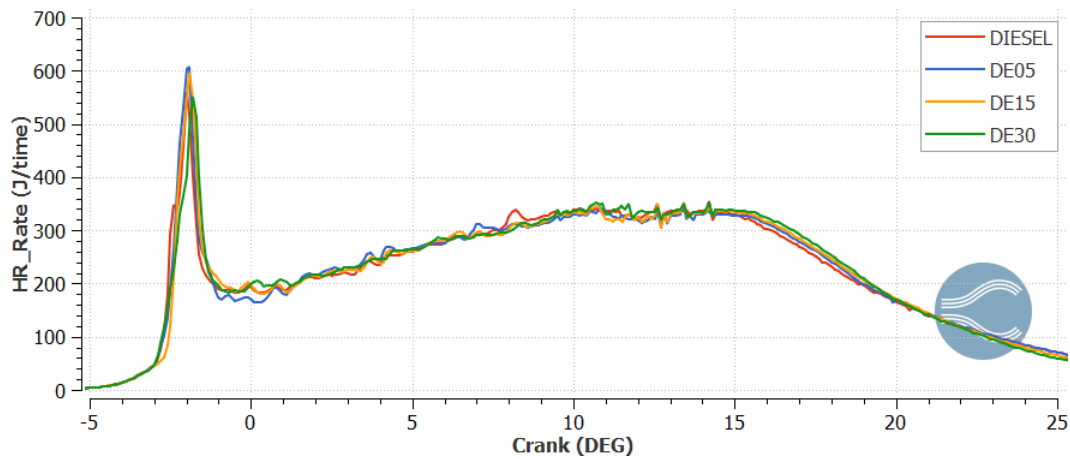


Figura 5.4: Taxa máxima de liberação de calor com o uso de etanol

Na figura 5.5, observa-se que a medida que o teor de etanol aumenta a máxima taxa de liberação de calor se desloca para maiores valores da posição do virabrequim, mostrando um leve atraso da combustão.

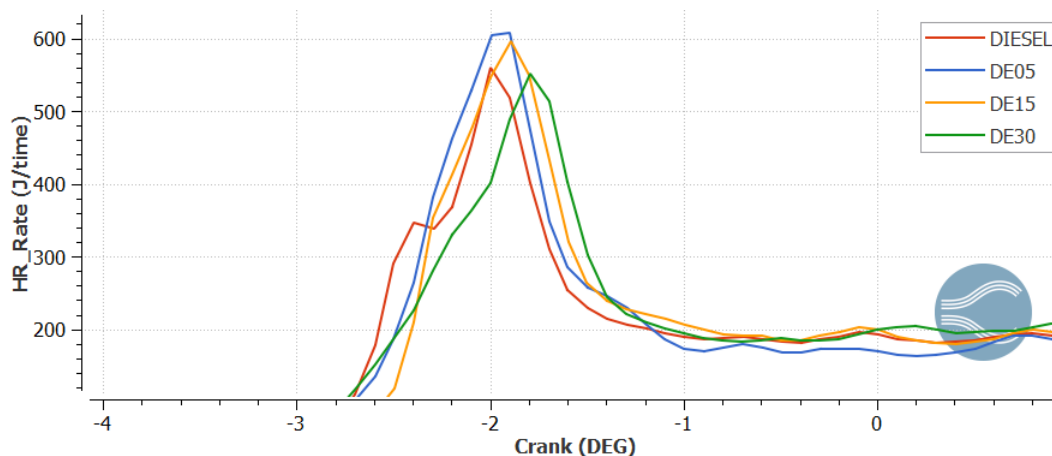


Figura 5.5: Taxa de liberação de calor com o uso de etanol detalhada

O atraso da ignição teria como efeito o início da ignição somente após o pistão atingir ponto morto superior, resultando em uma redução da liberação máxima de calor devido a redução da pressão no cilindro no momento da combustão. Entretanto, observa-se que as misturas contendo etanol, não só demonstraram esse atraso como obtiveram dados de liberação de calor acima da mistura contendo 100% de diesel marítimo. Outros dois fatores que podem influenciar na taxa de liberação de calor é o PCI da mistura e a velocidade da queima. Uma queima mais rápida pode compensar esse efeito adverso do atraso da ignição, garantindo que a maior parte da energia seja liberada enquanto o pistão ainda está próximo ao PMS. Isso resulta em uma pressão mais alta durante a fase inicial da expansão, melhorando a eficiência do motor,

como observado nos dados de eficiência, onde as misturas de etanol obtiveram eficiência acima do diesel marítimo.

### 5.1.2 Pressão e Temperatura Máxima

Para o perfil de pressão máxima visualizado na figura 5.6, foi detalhado na figura 5.7, com intervalo específico do processo de combustão. As misturas contendo etanol demonstraram pontos com pressões superiores às com diesel marítimo em até 22,15%; 25,80% e 24,33% para DE05, DE15 e DE30, respectivamente.

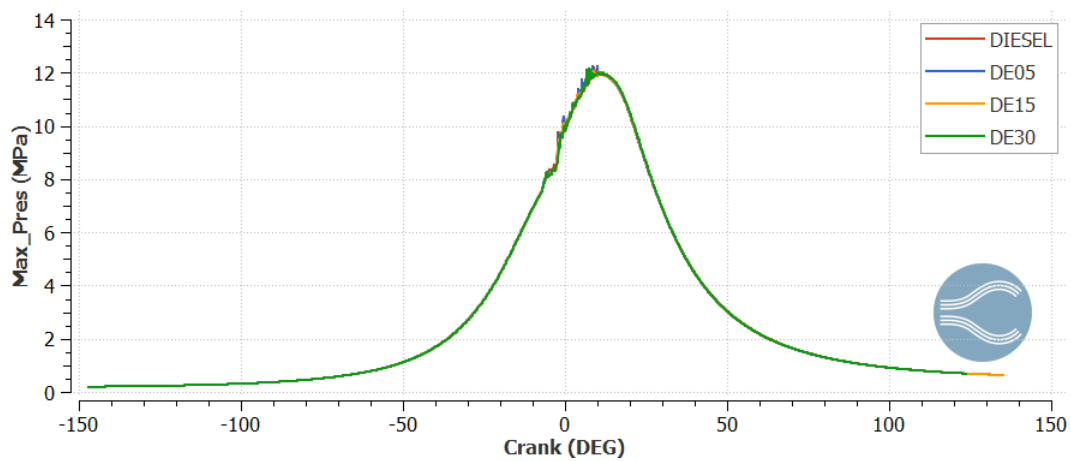


Figura 5.6: Perfil de pressão máxima das misturas de etanol

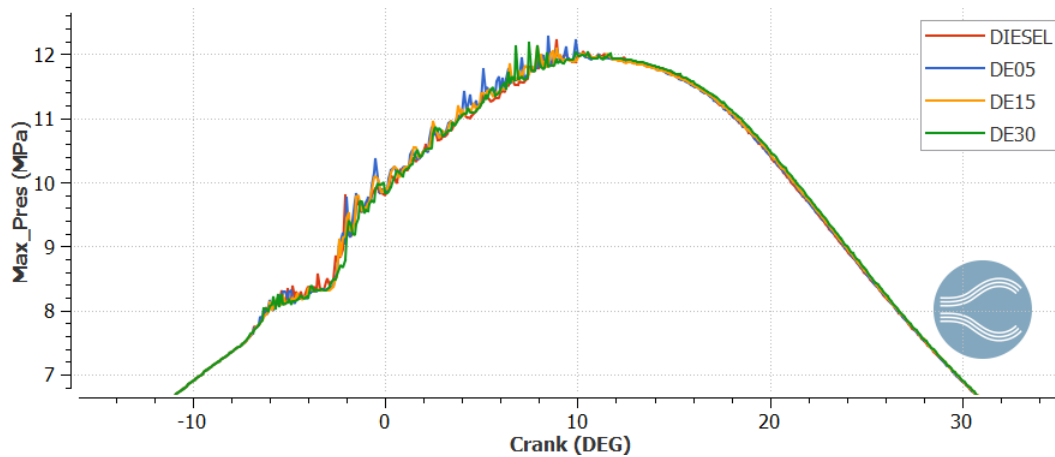


Figura 5.7: Perfil de pressão máxima durante o processo de combustão das misturas de etanol

Tabela 5.3: Pressões e Temperaturas máximas das misturas de diesel e etanol

Mistura	Pressão Máxima (MPa)	Temperatura Máxima (K)
DIESEL	12,24	2874,25
DE05	12,28	2886,97
DE15	13,19	2878,39
DE30	13,08	2870,43

Embora o perfil de temperatura máxima visto na figura 5.8 se mantenha com uma diferença mínima entre as misturas no início da combustão, a mistura contendo o diesel marítimo sofre uma queda de temperatura de forma mais rápida que as misturas contendo etanol, de tal forma que entre 40° a 80° do ângulo do virabrequim, a média das diferenças de temperatura máxima entre o diesel convencional com DE05, DE15, e DE30 são respectivamente 3,38%; 5,03% e 7,30%. Indicando que quanto maior a concentração de etanol na mistura, maior é a temperatura máxima. Isso pode se atrelado à composição química do etanol que contem oxigênio, o que resulta em uma combustão mais completa e eficiente da mistura.

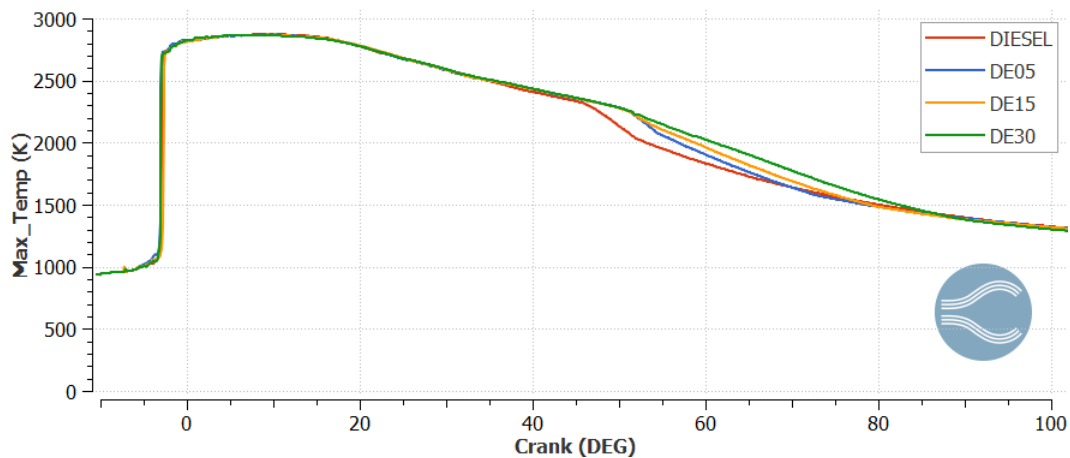


Figura 5.8: Perfil de temperatura das misturas contendo etanol

### 5.1.3 Emissões

Ao avaliar o desempenho das emissões com a energia injetada na simulação tem-se o seguinte cenário:

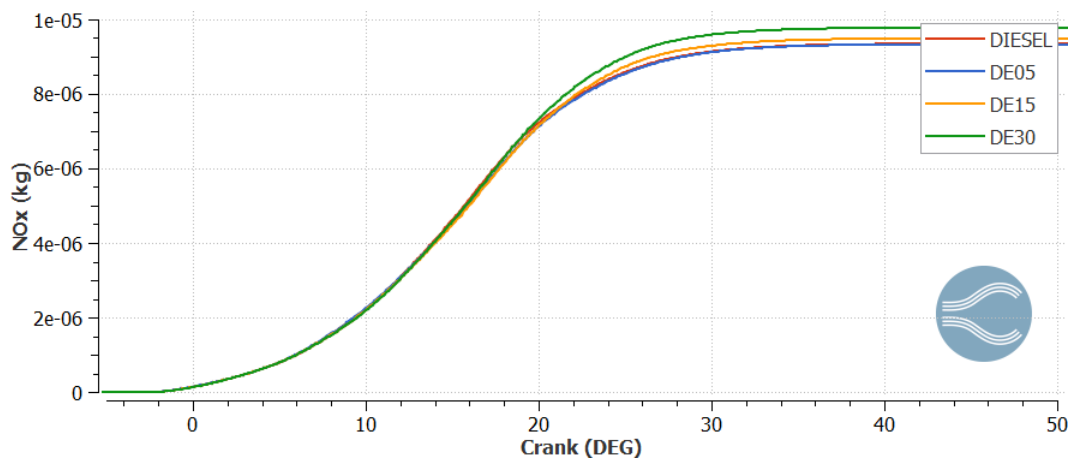
Tabela 5.4: Emissões das misturas binárias de diesel marítimo com etanol

mistura	$NO_x$ (g/kWh)	Fuligem (g/kWh)	HC (g/kWh)	CO (g/kWh)	$CO_2$ (g/kWh)
DIESEL	4,88	4,62E-01	1,25E+04	5,39E+04	2,64E+03
DE05	5,07	4,77E-01	1,33E+04	5,49E+04	2,74E+03
DE15	5,25	4,80E-01	1,31E+04	5,50E+04	2,79E+03
DE30	5,84	5,14E-01	1,31E+04	5,68E+04	3,02E+03

O acréscimo de etanol nas misturas aumentou toda as emissões com exceção dos hidrocarbonetos. A mistura contendo 30% de etanol demonstrou o pior desempenho do grupo, gerando um acréscimo de até 19,67 %  $NO_x$  emitido. Para a fuligem, CO e  $CO_2$  o cenário foi parecido, houve aumento de 11,26%, 5,38% e 14,39%, respectivamente.

O cenário para os hidrocarbonetos foi um pouco diferente, embora tenha demonstrando um aumento inicial das emissões, o acréscimo de etanol na mistura reduziu as as emissões de hidrocarboneto no final, com o DE30 demonstrando o melhor desempenho com uma redução de 8,75%.

Ao comparar com resultados em outros estudos, observa-se que o o aumento da fuligem em decorrência da concentração de fuligem já foi observado nas pesquisas de Adrian. Entretanto, o aumento do  $NO_x$  não foi observado nesse estudo, o incremento de etanol induziu redução do  $NO_x$  com o aumento de temperatura.

Figura 5.9: Emissões de  $NO_x$  com o uso de etanol

O acréscimo da concentração de etanol na mistura corroborou para uma formação maior de  $NO_x$  durante o processo de combustão. A formação de  $NO_x$  ocorre principalmente em ambientes com maior teor de oxigênio. A composição química do etanol aumenta o teor de oxigênio durante a combustão, favorecendo o aumento das emissões de  $NO_x$  na mistura, como observado nos resultados tabela 5.4.

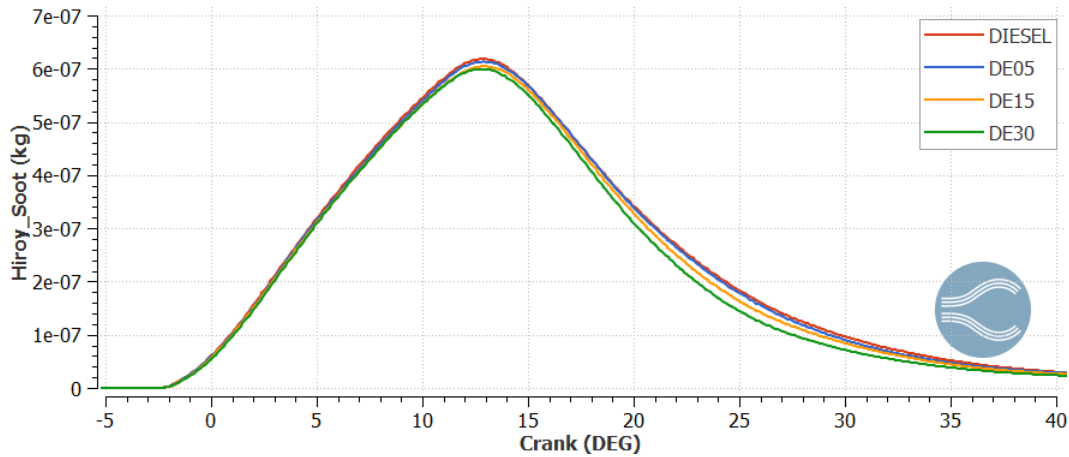


Figura 5.10: Emissões de fuligem com o uso de etanol

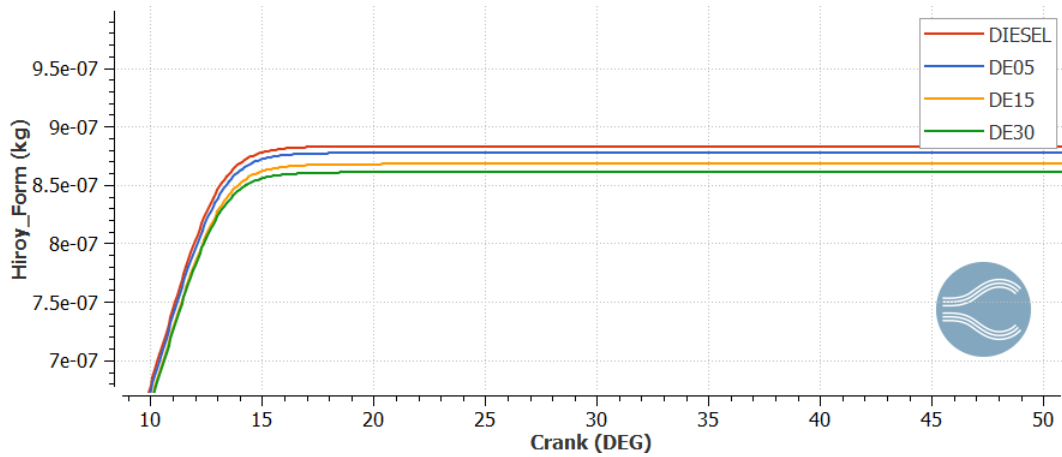


Figura 5.11: Emissões de fuligem totais com o uso do etanol

## 5.2 Simulação Diesel + Etanol + Biodiesel

O segundo conjunto de simulações consistiu principalmente na utilização de uma mistura ternária envolvendo diesel marítimo, biodiesel (20%) e etanol, variando a concentração de etanol em cada simulação: B20 (Diesel marítimo com 20% de biodiesel), B20E05, B20E15 e por último B20E30.

A massa total de diesel, e etanol injetadas na câmara de combustão é observada nas figuras 5.12 e 5.13

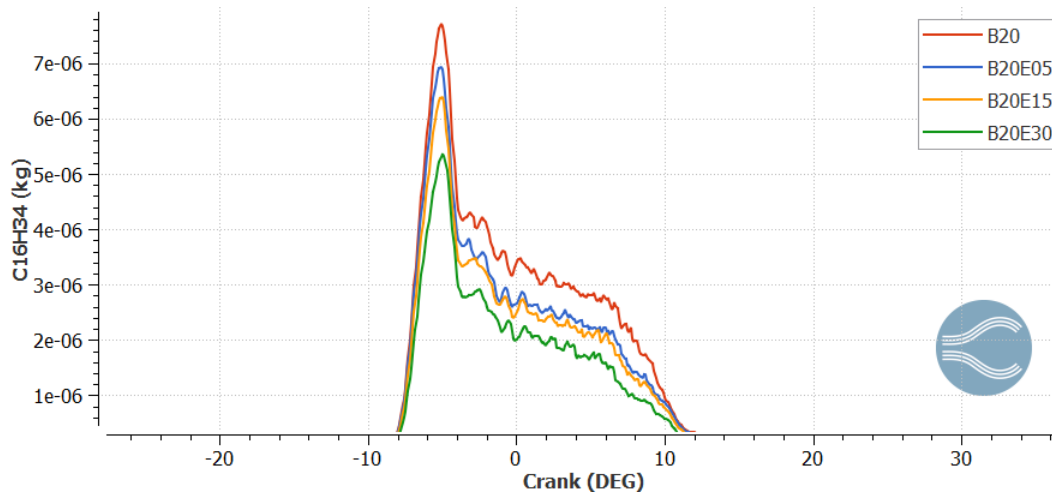


Figura 5.12: Carregamento de diesel no motor

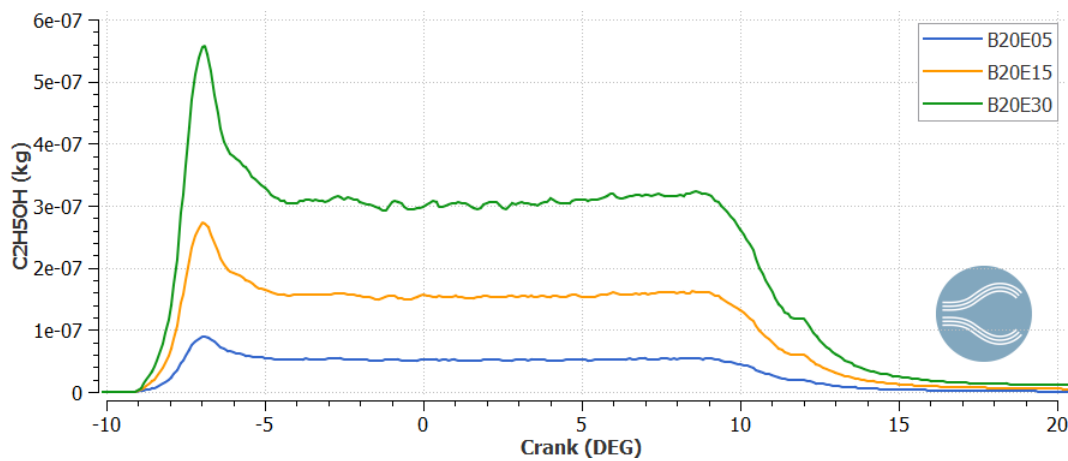


Figura 5.13: Carregamento de etanol no motor

### 5.2.1 Taxa de Liberação de Calor

O acréscimo de etanol nas misturas demonstra um potencial de maior liberação de calor na combustão, como observado nos gráficos das figuras 5.14 e 5.15, com B20E30 chegando a um aumento de de 46,11% de calor a mais do que a capacidade máxima de geração de calor sem o etanol. a mistura contendo B20E05 demonstrou uma taxa de calor 34,37% acima do B20, enquanto o B20E05 demonstrou um aumento de 15,86%.

Tabela 5.5: Taxa de Liberação de calor das misturas contendo biodiesel e etanol

Mistura	Taxa de Liberação de Calor máxima (J)
B20	547,28
B20E05	735,40
B20E15	634,07
B20E30	799,63



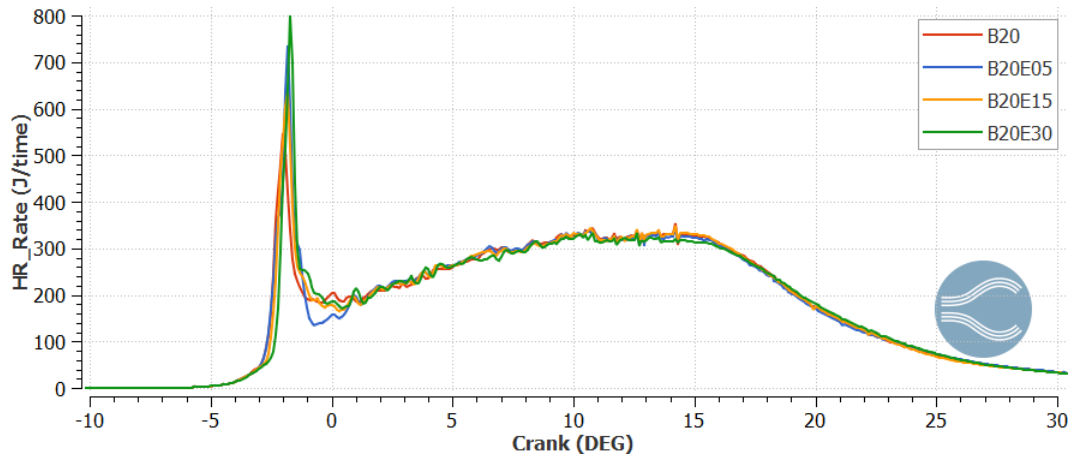


Figura 5.14: Taxa de liberação de calor nas misturas com biodiesel + etanol

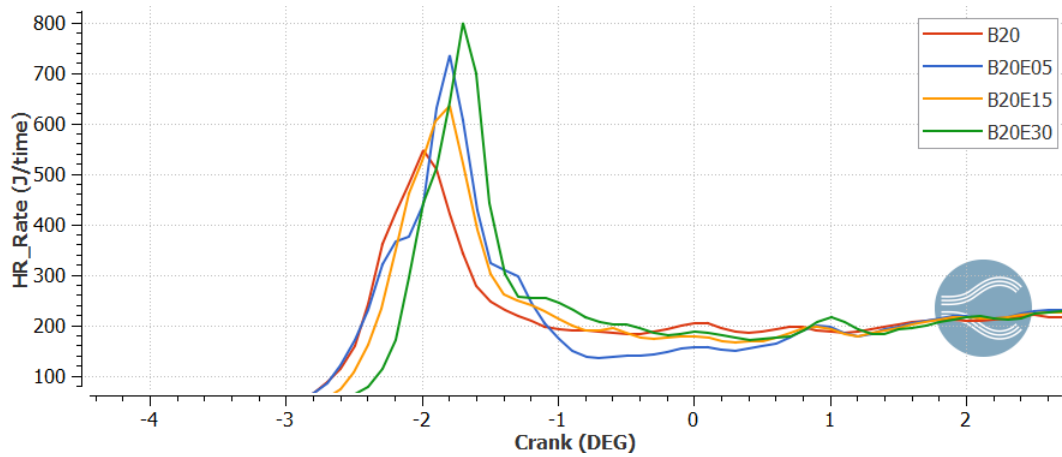


Figura 5.15: Taxa de liberação de calor detalhada nas misturas com biodiesel + etanol

### 5.2.2 Pressão e Temperatura Máxima

Analisando os dados de pressão máxima no gráfico da figura 5.16, e posteriormente detalhada no intervalo da combustão na figura 5.17, observa-se que a maior pressão dentro da câmara ocorre com a mistura de B20E15, totalizando 5,80% a mais do que a pressão exercida pelo B20, enquanto as misturas de B20E05 e B20E30 demonstram pressões menores do que o B20, sem ausência do etanol. Ambas possuem respectivamente uma redução de 0,57% e 0,08% de máxima pressão.

Tabela 5.6: Pressões e Temperaturas Máximas das misturas contendo biodiesel e etanol

Mistura	Pressão Máxima (MPa)	Temperatura Máxima (K)	Energia Injetada (J)
B20	12,23	2873,40	1,82E-03
B20E05	12,16	2872,57	1,85E-03
B20E15	12,94	2873,72	1,77E-03
B20E30	12,22	2867,62	1,63E-03

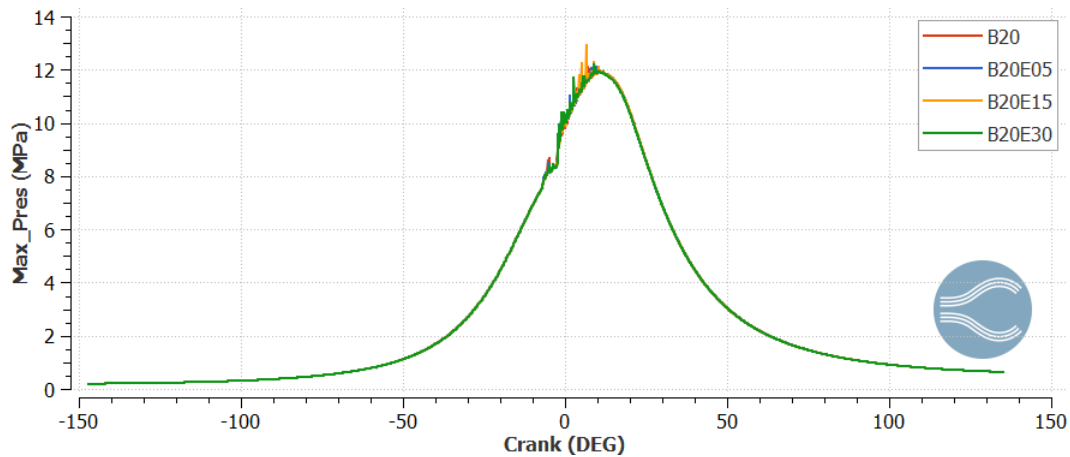


Figura 5.16: Pressão máxima durante a simulação de biodiesel + etanol

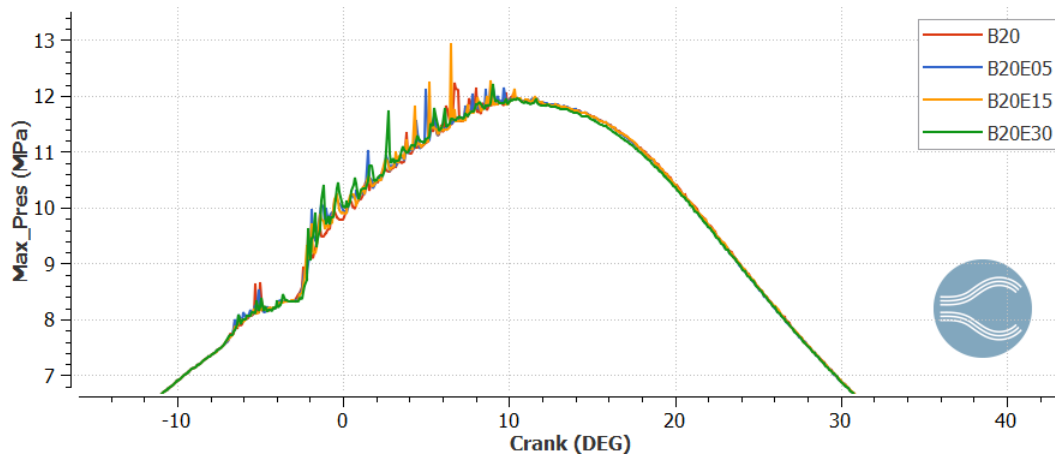


Figura 5.17: Pressão Máxima detalhada durante as simulações de biodiesel + etanol

Já a temperatura máxima, Assim como nas simulações sem biodiesel, seus maiores pontos possuem temperaturas máximas semelhantes, visto figura 5.18, com o B20E15 possuindo uma temperatura máxima ligeiramente superior ao B20. Outro comportamento que se mantém com o acréscimo de etanol é a disparidade entre as temperaturas máximas entre os pontos de 40º a 80º do virabrequim. O acréscimo de etanol colabora uma temperatura máxima

maior durante a simulação, chegando a até um acréscimo de 8,68% no B20E30, quando comparado à mistura de B20, sem etanol. o acréscimo nas misturas de B20E05 e B20E15 é de exatamente: 3,01% e 2,45% respectivamente.

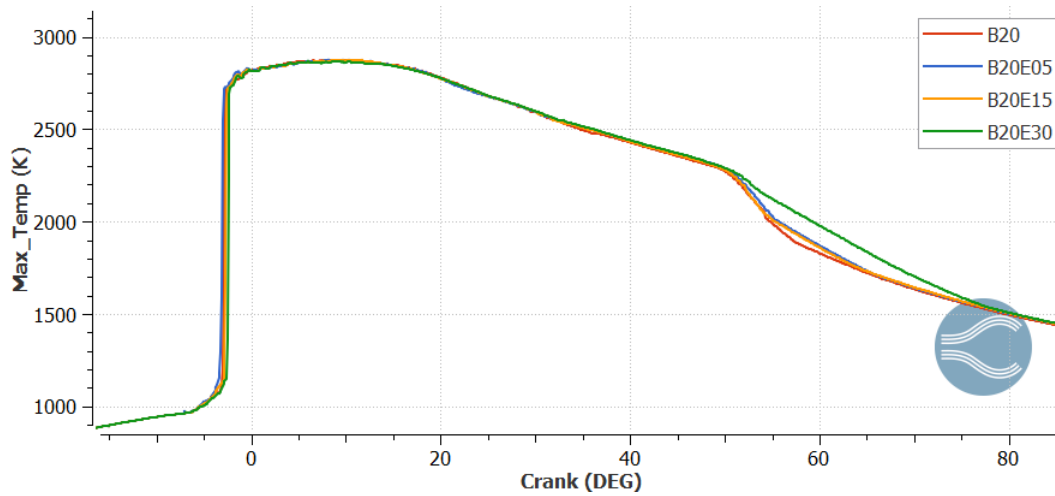


Figura 5.18: Temperatura máxima durante as simulações de biodiesel + etanol

### 5.2.3 Emissões

Ao analisar o cenário das emissões por energia injetada, tem-se os seguintes resultados:

Tabela 5.7: Emissões das misturas ternárias contendo diesel marítimo, etanol e biodiesel

mistura	$NO_x$ (g/kWh)	Fuligem (g/kWh)	HC (g/kWh)	CO (g/kWh)	$CO_2$ (g/kWh)
B20	5,20	4,88E-01	3,42E+03	1,42E+4	2,77E+02
B20E05	5,04	4,85E-01	3,46E+03	1,38E+4	2,73E+2
B20E15	5,30	5,00E-01	3,60E+03	1,43E+4	2,85E+02
B20E30	5,53	5,34E-01	3,94E+03	1,58E+4	3,09E+2

Assim como nos resultados das misturas binárias, o acréscimo do etanol na mistura afeta negativamente o cenário das emissões: a mistura B20E30 demonstrou o pior resultado, possuindo um acréscimo em todas as emissões: 6,39% em  $NO_x$ , 9,44% em fuligem, 15,15% em HC, 11,57% em CO e 11,35% em  $CO_2$ .

Entretanto, observa-se que a mistura B20E05 apresenta redução das emissões de  $NO_x$ , fuligem,  $CO_2$  e CO para a mistura B20E05, com redução de 3,02%, 0,68%, 1,46% e 2,61% respectivamente. Já para as emissões de HC do B20E05, há um acréscimo de 1,07% das emissões.

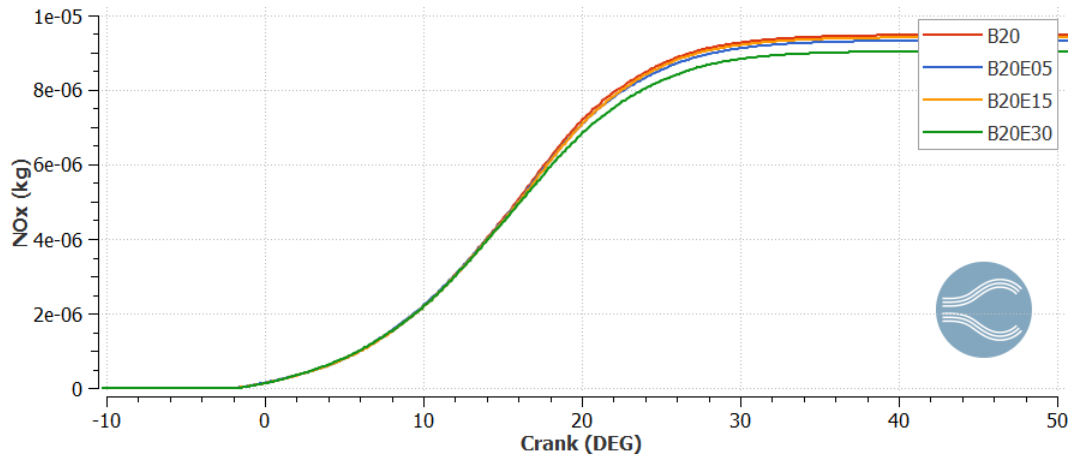


Figura 5.19: Emissão de  $NO_x$  nas misturas de biodiesel + etanol

Ao analisar as emissões totais de  $NO_x$ , observa-se que o uso de etanol demonstrou uma redução das emissões, ao contrário do que foi observado nas misturas sem biodiesel. Embora as misturas com biodiesel demonstraram uma taxa de liberação de calor maior do que as misturas binárias, o perfil de temperatura máxima das misturas com biodiesel foi menor, o que corrobora uma redução de  $NO_x$  nas emissões.

Outro ponto é que a maior eficiência de combustão e a menor produção de HC não queimados nas misturas com biodiesel resultam em uma menor competição por radicais OH, que seriam originalmente utilizados nas reações com os HC. Com menos HC consumindo radicais OH, há uma maior disponibilidade desses radicais para reagir com os óxidos de nitrogênio como NO e  $NO_2$ , promovendo a redução de  $NO_x$  nas emissões totais da mistura.

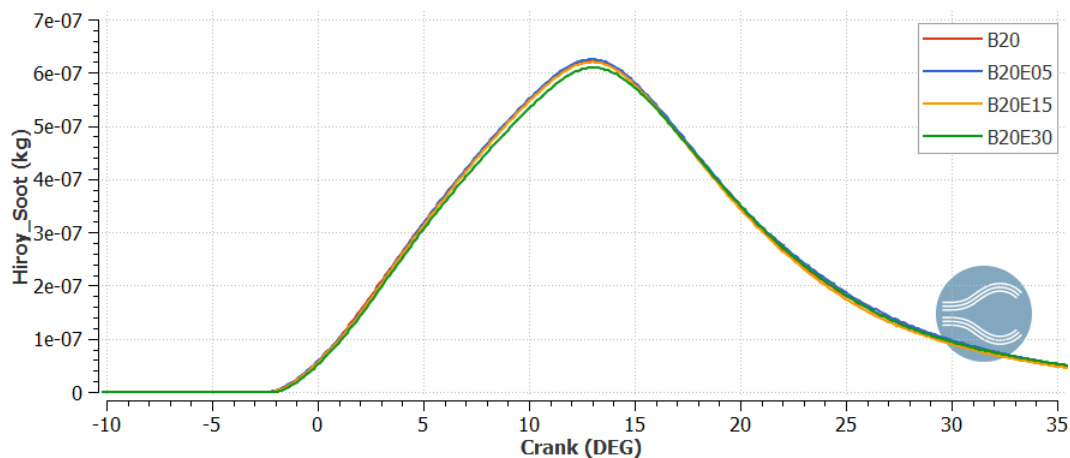


Figura 5.20: Emissão de fuligem nas misturas de biodiesel + etanol

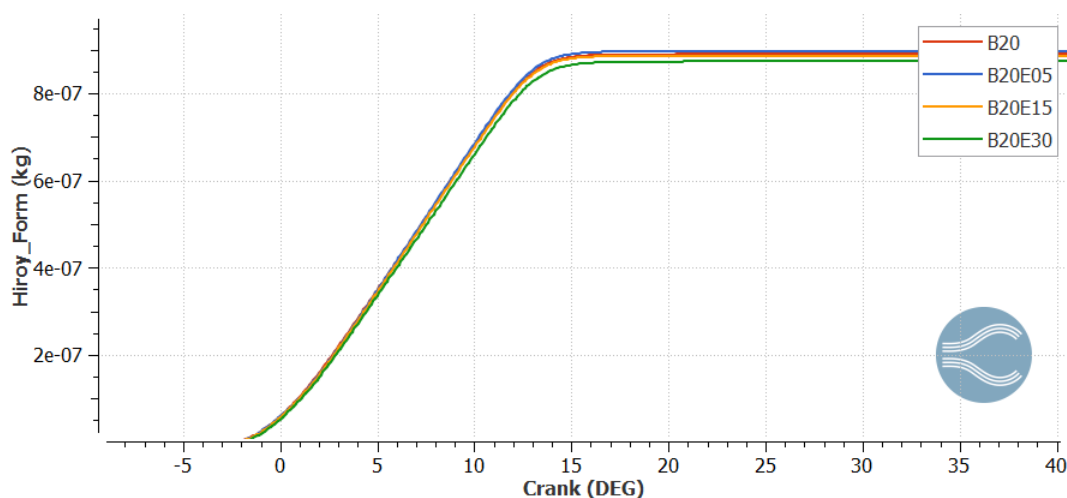


Figura 5.21: Emissão detalhada de fuligem nas misturas ternárias

### 5.3 Misturas binárias x Ternárias

Para a comparação dos resultados das misturas binárias e ternárias, foi adotado a comparação entre as misturas com mesma concentração de etanol: DIESEL com B20, B20E05 com DE05, B20E15 com DE15, B20E30 com DE30. Dessa forma é possível avaliar o desempenho do biodiesel na mistura, o que não podia ser feito anteriormente com a análise da variação do etanol.

#### 5.3.1 Taxa de liberação de calor

Ao comparar a liberação de calor entre as misturas contendo biodiesel e as que não possuem, observa-se que com exceção B20 que apresentou uma redução de 2,26% de calor liberado, todas as misturas apresentam um grau de taxa de liberação acima do que as que não contem biodiesel: B20E05, B20E15 e B20E30 possuem uma taxa de liberação de calor máxima 15,84%, 6,11% e 44,66% acima da taxas das misturas binárias sem biodiesel, respectivamente.

#### 5.3.2 Pressão e Temperatura Máxima

Avaliando a pressão máxima, com exceção do B20E05 que apresentou uma pressão máxima 6,15% menor que o DE05, as misturas B20, B20E15 e B20E30 apresentaram pressões máximas menores do que as sem biodiesel com reduções de 0,08%, 0,98% e 6,57% respectivamente. A redução das pressão com a adição do biodiesel é um perfil semelhante ao que foi encontrado no estudo de Adrian, que também concluiu que a adição de biodiesel na mistura causa uma redução da pressão máxima exercida pela mistura.

Com relação a temperatura máxima, as misturas sem biodiesel apresentaram temperaturas semelhantes às misturas contem biodiesel. A adição do

biodiesel nas misturas B20, B20E05, B20E15 e B20E30 apresentaram leves reduções de 0,03%, 0,5%, 0,16% e 0,1% respectivamente.

### 5.3.3 Emissões

As emissões de  $NO_x$ , contendo biodiesel apresentaram resultados variados, as misturas B20 e B20E15 demonstraram aumentos de 6,40% e 1,06% quando comparados com o diesel 100% e a mistura DE15, respectivamente. Já as misturas B20E05 e B20E30 apresentaram reduções de 0,59% e 5,38% das emissões de  $NO_x$ , comparado às DE05 e DE30, respectivamente

As emissões de  $CO_2$ , CO e hidrocarbonetos sofreram reduções significativas com a utilização do biodiesel, as emissões de  $CO_2$ , CO e HC nas misturas reduziram em média 89,78% e 73,69% e 72,51%, respectivamente.

## 6 Conclusão

Com o intuito de atingir as metas globais de redução das emissões de  $CO_2$ , a busca por fontes de energias mais limpas é demasiada importante. Dentre as metas da IMO, há o intuito de que seus combustíveis tenham até 5% de biocombustíveis até 2030, destacando o foco em biocombustíveis na transição energética. Embora o consumo de misturas de diesel e biodiesel já sejam implementadas por leis no setor rodoviário, não há ainda na escala comercial misturas envolvendo o etanol e biodiesel disponíveis no mercado para o setor marítimo, embora já existem estudos demonstrando seu potencial.

O uso de misturas com diesel e etanol demonstrou uma eficiência maior da combustão. Mas também corroborou em o aumento das emissões de forma geral. Isso pode ser atrelado a condição não otimizadas da simulação, além de que o PCI menor das misturas com etanol gera a necessidade de injetar mais combustível na mistura, gerando uma queima maior, e por consequência, mais poluentes.

Quando adicionado o biodiesel na mistura, houve um aumento positivo da eficiência da combustão o que pode ser atrelado à maior taxa de calor liberada durante o processo de combustão. Observou-se também uma redução significativa das emissões de  $CO$ ,  $CO_2$  e  $NH$  quando comparado com os resultados sem biodiesel. Entretanto, assim como as misturas contendo etanol, o biodiesel contribuiu negativamente para o aumento de fuligem e  $NO_x$  emitidos quando comparado ao diesel convencional.

Embora estudos mais aprofundados na otimização da simulação do converge ainda são necessários para resultados mais precisos, o uso do biodiesel é promissor para a redução das emissões dos gases de efeito estufa. Já o etanol, embora tenha apresentado resultados negativos nas simulações na questão das emissões, contribuiu positivamente para a eficiência do motor em questão. Além de que uma modelagem mais precisa do motor pode contribuir positivamente para resultados futuros.

Para os próximos trabalhos, é necessário realizar testes experimentais, a fim de obter dados experimentais robustos, que podem tornar a configuração da simulação mais precisa, validando os resultados das simulações.

# Referências Bibliográficas

- [1] SEEG. *Análise das emissões de gases de efeito estufa e suas implicações para as metas climáticas do Brasil*, 2023. Disponível em: <http://seeg.eco.br/>.
- [2] RITCHIE H. *Sector by sector: where do global greenhouse gas emissions come from?*, 2020. Disponível em: <https://ourworldindata.org/ghg-emissions-by-sector>'.
- [3] IPCC. *Climate Change 2023: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [Core Writing Team, H. Lee and J. Romero (eds.)]*, 2023. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0360-3199\(95\)00030-H](https://doi.org/10.1016/0360-3199(95)00030-H).
- [4] UNITED NATIONS ENVIRONMENT PROGRAMME. *Emissions Gap Report 2023: Broken Record – Temperatures hit new highs, yet world fails to cut emissions (again)*, 2023. Nairobi. Disponível em: <https://doi.org/10.59117/20.500.11822/43922>'.
- [5] EMBRAPA. *Soluções inovadoras impulsionam a transição energética da indústria brasileira*, 2023. Disponível em: <https://www.embrapa.br/busca-de-noticias/-/noticia/84767849/solucoes-inovadoras-impulsionam-a-transicao-energetica-da-industria-brasileira?link=agencia>.
- [6] GOV. *PL que traz novos percentuais para a mistura de etanol e biodiesel vai para o Senado Federal*, 2024. Disponível em: <https://www.gov.br/mme/pt-br/assuntos/noticias/pl-que-traz-novos-percentuais-para-a-mistura-de-etanol-e-biodiesel-vai-para-senado#:~:text=Atualmente%2C%20o%20percentual%20vigente%20em,%20%25%20em%20mar%C3%A7o%20de%202030>.
- [7] PETROBRÁS. *Diesel Marítimo: navegue com segurança, em qualquer clima*. Disponível em: <https://petrobras.com.br/quem-somos/oleo-diesel-maritimo#:~:text=plataformas%20de%20petr%C3%B3leo.-,Diesel%20Mar%C3%ADtimo%20Petrobras,o%20melhor%20custo%20x%20benef%C3%ADcio>.
- [8] OECD. *Ocean shipping and shipbuilding*. Disponível em: <https://www.oecd.org/ocean/topics/ocean-shipping/#:~:>



text=The%20main%20transport%20mode%20for,can%20create%20economic%20value%20added.

- [9] IMO. **IMO's work to cut GHG emissions from ships**. <https://www.imo.org/en/MediaCentre/HotTopics/Pages/Cutting-GHG-emissions.aspx>.
- [10] DE REZENDE T. M. B. **Análise da cadeia produtiva italiana do biodiesel: modelos de negócios e estratégias competitivas**, 2009. Disponível em: <https://bdta.abcd.usp.br/directbitstream/7c535999-2807-49cc-827e-033c6f8263f8/TatianaMartinsBacelardeRezende%20TCCPR009.pdf>.
- [11] HEYWOOD J. **Internal Combustion Engine Fundamentals**, 1988. New York: McGraw-Hill.
- [12] LEITE C. F. R. **Estudo numérico do motor de ignição por compressão controlada por centelha**, 2020. Trabalho de Fim de Curso (Graduação). Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio). Disponível em: <https://doi.org/10.17771/PUCRio.acad.46597>.
- [13] NEVES G. S. **ANÁLISE TERMODINÂMICA DE UMA TURBINA DE GÁS CONSIDERANDO DIFERENTES CONFIGURAÇÕES**, 2023. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Mecânica). Universidade federal do Rio Grande do Sul. Disponível em: <https://lume.ufrgs.br/bitstream/handle/10183/251680/001152940.pdf?sequence=1>.
- [14] MATTOS A. P. **Estudo do desempenho de um motor turboalimentado a etanol empregando EGR para redução de emissões de NOx e controle de detonação.**, 2018. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica). Universidade Estadual de Campinas. Disponível em: <https://doi.org/10.47749/T/UNICAMP.2018.1061421>.
- [15] ADRIAN, V. N.; CATALIN, N. D.; RADU, C. **On some possible effects of using renewable oxygenated fuels in a large marine diesel engine**, 2022. Energy Reports. Vol. 8, pp. 966 – 977. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.egyr.2022.07.129>.
- [16] RICHARDS, K. J.; SENEAL, P. K.; POMRANING, E. **CONVERGE 3.1**, 2023. Madison, WI: Convergent Science,.
- [17] PETROBRAS. **COMBUSTÍVEIS MARÍTIMOS: Informações Técnicas**, 2021. (Versão jan/2021).

- [18] ANP. **Óleo Diesel**, 2020. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/assuntos/producao-de-derivados-de-petroleo-e-processamento-de-gas-natural/producao-de-derivados-de-petroleo-e-processamento-de-gas-natural/oleo-diesel>.
- [19] PETROBRAS. **Petrobras avança em testes de combustível marítimo com conteúdo renovável**, 2023. Disponível em: <https://agencia.petrobras.com.br/w/sustentabilidade/petrobras-avanca-em-testes-de-combustivel-maritimo-com-conteudo-renovavel>.
- [20] ANP. **ANP aprova uso experimental de biodiesel B100 na navegação fluvial**, 2023. Disponível em: [https://www.gov.br/anp/pt-br/canais\\_atendimento/imprensa/noticias-comunicados/anp-aprova-uso-experimental-de-biodiesel-b100-na-navegacao-fluvial#:~:text=A%20Resolu%C3%A7%C3%A3o%20ANP%20n%C2%BA%20910,expressamente%20a%20utiliza%C3%A7%C3%A3o%20em%20embarca%C3%A7%C3%B5es](https://www.gov.br/anp/pt-br/canais_atendimento/imprensa/noticias-comunicados/anp-aprova-uso-experimental-de-biodiesel-b100-na-navegacao-fluvial#:~:text=A%20Resolu%C3%A7%C3%A3o%20ANP%20n%C2%BA%20910,expressamente%20a%20utiliza%C3%A7%C3%A3o%20em%20embarca%C3%A7%C3%B5es).
- [21] ANP. **Especificação do biodiesel**, 2023. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/assuntos/producao-e-fornecimento-de-bicombustiveis/biodiesel/biodiesel/especificacao-do-biodiesel>.
- [22] YANG, N.; DENG, X.; LIU, B.; LI, L.; LI, Y.; LI, P.; TANG, M.; WU, L. **Combustion Performance and Emission Characteristics of Marine Engine Burning with Different Biodiesel**, 2022. *Energies*; Disponível em: <https://doi.org/10.3390/en15145177>.
- [23] DA ROCHA J. M. G. **Análise de dados experimentais obtidos com misturas diesel-biodiesel-etanol (DBE) em motores de ignição por compressão**, 2018. Disponível em: <https://www.maxwell.vrac.puc-rio.br/projetosEspeciais/TFCs/consultas/conteudo.php?strSecao=resultado&nrSeq=45466@1>.
- [24] CETESB. **Etanol**, 2020. Disponível em: <https://cetesb.sp.gov.br/laboratorios/wp-content/uploads/sites/24/2020/12/Etanol.pdf>.
- [25] M. F. VIDAL. **Agroindústria - Etanol**, 2020. Disponível em: [https://www.bnb.gov.br/s482-dspace/bitstream/123456789/1409/3/2022\\_CDS\\_237.pdf](https://www.bnb.gov.br/s482-dspace/bitstream/123456789/1409/3/2022_CDS_237.pdf).

- [26] FORBES. *Raízen e Wartsila pesquisam uso de etanol no transporte marítimo*, 2023. Disponível em: <https://forbes.com.br/sem-categoria/2023/10/raizen-e-wartsila-pesquisarao-uso-de-etanol-no-transporte-maritimo/>.
- [27] MEIRELES C. R. S. *Efeito da adição de etanol ao diesel utilizando co-solventes*, 2015. Disponível em: <https://monografias.ufma.br/jspui/bitstream/123456789/1433/1/ClaraMeireles.pdf>.
- [28] PRADELLE F. A. Y. *Use of biofuels in compression ignition engines - Potential of diesel-biodiesel-ethanol blends*, 2017. Disponível em: <https://www.maxwell.vrac.puc-rio.br/29914/29914.PDF>.
- [29] KHAN, M.; KADIAN, A. K.; SHARMA, R. P. *Attempt to mitigate marine engine emissions with improved performance by the investigation of alcohol inclusion in sunflower biodiesel-sunflower oil-diesel blend. Environ Sci Pollut Res* 30, 33974–33991, 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11356-022-24147-6>.
- [30] BOUSBAA, H.; TARABET, L.; KHATIR, N.; LIAZID, A. *NUMERICAL STUDY ON A DIESEL ENGINE FUELED BY EUCALYPTUS BIOFUEL USING CONVERGE CFD SOFTWARE*, 2020. Disponível em: [https://www.researchgate.net/publication/227001924\\_Numerical\\_simulation\\_of\\_biodiesel\\_fuel\\_combustion\\_and\\_emission\\_characteristics\\_in\\_a\\_direct\\_injection\\_diesel\\_engine](https://www.researchgate.net/publication/227001924_Numerical_simulation_of_biodiesel_fuel_combustion_and_emission_characteristics_in_a_direct_injection_diesel_engine).